Вестник

Российско-Армянского университета

№1

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

ISSN 1829-0450

ЕРЕВАН 2017

ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆ

Լ Ր Ա Բ Ե Ր

ՀԱՅ-ՌՈՒՍԱԿԱՆ ՀԱՄԱԼՍԱՐԱՆԻ

ՍԵՐԻԱ

ՖԻԶԻԿԱՄԱԹԵՄԱՏԻԿԱԿԱՆ
ԵՎ ԲՆԱԿԱՆ ԳԻՏՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐ

«Լրաբեր»-ի համարը կազմված է

«Նանոֆիզիկայի արդի խնդիրները»

Միջազգային գիտաժողովի նյութերի հիման վրա՝ նվիրված

ակադեմիկոս Է.Մ. Ղազարյանի ծննդյան 75 ամյակին

№ 1

ՀՌՀ Հրատարակչություն
Երևան 2017

РОССИЙСКО-АРМЯНСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

В Е С Т Н И К

РОССИЙСКО-АРМЯНСКОГО

УНИВЕРСИТЕТА

СЕРИЯ:

ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЕ
И ЕСТЕСТВЕННЫЕ НАУКИ

Номер «Вестника» составлен

по материалам Международной конференции

«Актуальные вопросы нанофизики», посвященной

75-летию со дня рождения академика Э.М. Казаряна

№ 1

Издательство РАУ
Ереван 2017

Печатается по решению Ученого совета РАУ

Вестник РАУ, № 1. – Ер.: Изд-во РАУ, 2017. – 124 с.

Редакционная коллегия:

Главный редактор *Амбарцумян С.А.*
Зам. главного редактора *Аветисян П.С.*
Ответственный секретарь *Шагинян Р.С.*

Члены редколлегии:

О.В. Бесов, В.И. Буренков, Г.Р. Вардапетян, М.А. Давтян, Г.Г. Данагулян, И.Д. Заславский, Г.Г. Казарян, Э.М. Казарян, Г.А. Карапетян, Б.И. Коноплев, Г.Б. Маранджян, Р.Л. Мелконян, В.И. Муронец, Б.С. Нагапетян, С.Г. Петросян, А.А. Саркисян, Г.З. Саркисян, А.Г. Сергеев

Журнал входит в перечень периодических изданий, зарегистрированных ВАК РА и базу данных РИНЦ.

Российско-Армянский университет, 2017 г.

ISBN 1829-0450

© Издательство РАУ, 2017

ЭТАПЫ НАУЧНО-ПЕДАГОГИЧЕСКОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ АКАДЕМИКА Э.М. КАЗАРЯНА



16-ого января 2017 года исполнилось 75 лет со дня рождения известного специалиста в области физики полупроводников и наноэлектроники, заслуженного деятеля науки РА, доктора физико-математических наук, профессора, академика НАН Армении Эдуарда Мушеговича Казаряна. Научная биография академика Казаряна является ярким примером беззаветного служения науке, начиная со студенческой скамьи и продолжающегося до сегодняшнего дня, когда наш юбиляр встречает свое 75-летие в расцвете сил и полон творческих начинаний. Свои первые шаги в науке Э.М. Казарян совершил, будучи сту-

дентом Физического факультета МГУ – под руководством одного из ярких представителей Боголюбовской школы теоретиков, профессора В.Л. Бонч-Бруевича. Пройдя довольно серьезную процедуру отбора, студент Казарян сконцентрировался на проблеме непрямого – плазмонного механизма межзонного поглощения в полупроводниках. Причем задачу необходимо было решать в рамках полевого приближения, которое является довольно сложным, и далеко под силу не каждому. С поставленной задачей молодой человек из Армении справился блестяще, ярким подтверждением чему стала публикация полученных результатов в одном из наиболее престижных журналов по физике “Physics Letters” по приглашению редактора данного издания. Причем статья была опубликована без соавторов.

Закончив с красным дипломом МГУ, Э.М. Казарян поступил в аспирантуру к профессору Бонч-Бруевичу и после ее завершения успешно защитил кандидатскую диссертацию, получив ученую степень кандидата физико-математических наук. После защиты диссертации Э.М. Казарян начинает свою трудовую деятельность на кафедре физики твердого тела Физического факультета ЕГУ. Именно в этот период академик Казарян начинает закладывать основы своей большой научной школы. Первыми учениками Эдуарда Мушеговича становятся: Р. Энфиаджян, В. Арутюнян, С. Арутюнян, А. Джотян и др. На календаре начало 70-х гг.: молодой научный лидер и его ученики начинают теоретическое исследование недавно реализованных и совершенно экзотических физических объектов – размерно-квантованных полупроводниковых пленок. Уникальность этих систем заключалась в том, что их физическими свойствами можно управлять довольно гибким образом и на их основе создавать приборы с наперед заданными физическими характеристиками. Глубокая физическая интуиция Казаряна подсказывала, что исследование подобных систем является чрезвычайно перспективным и многообещающим. Как показало время, он оказался абсолютно прав. В те далекие годы коллектив молодых уче-

ных даже не мог предположить, что обнаружил «научный Клондайк» и что в будущем их команда будет участвовать в создании научной ветви физики полупроводников, которая станет одним из символов технологического прорыва первой четверти XXI века, а именно – нанотехнологий. В период с 1972 по 1975 гг. публикуются «пионерские» работы по оптике размерно-квантованных пленок, экситонным и примесным состояниям в таких системах. Эти работы сразу привлекли внимание научного сообщества, ярким свидетельством чему являются многочисленные ссылки на них.

В 1975 году начинается новый этап в научной и педагогической деятельности академика Казаряна. Ему предлагают возглавить кафедру «Физики» в Ереванском политехническом институте. Со свойственным ему энтузиазмом Эдуард Мушегович начинает активную научную и учебно-организационную деятельность в стенах Политеха. За короткий срок ему удается превратить кафедру в ведущий учебный и научный центр Армении. Организуются семинары, конференции, республику посещают всемирно известные специалисты в области физики полупроводников и электроники. На базе Политеха создается вторая генерация научной школы Казаряна, яркими представителями которой становятся: К. Агаронян, С. Аветисян, Г. Минасян, В. Григорян. Цикл научных работ, проводимых в Политехе, охватывает вопросы, связанные с физическими процессами в размерно-квантованных пленках и проволоках при наличии внешних полей, а также непараболичности закона дисперсии носителей заряда, с одной стороны, и взаимодействием лазерного излучения с полупроводниками, с другой. Здесь также получен ряд новационных результатов, которые цитируются в монографиях и многочисленных статьях. На основе полученных результатов в 1982 году Э.М. Казарян защищает докторскую диссертацию.

Параллельно с научной деятельностью Казарян проводит активную учебно-методическую работу, при этом особое внимание уделяя проблемам школьного образования. Не случайно, поэтому, что в 1988

году ему предлагают занять пост первого заместителя министра Народного образования Армянской ССР. 1988 год – один из самых противоречивых в истории нашего народа. Это – год национального возрождения, год подъема национальной идеи и духа, начала борьбы за Карабах. Однако это и год национальной катастрофы – Спитакского землетрясения, начала этнических чисток в Азербайджане. Советский союз рушился, и всем становилось понятно, что грядут новые времена и период турбулентностей. Именно в этот период Э.М. Казарян становится одним из ключевых руководителей Министерства народного образования Армении. Приходится постоянно адаптироваться с динамично меняющимися процессами и даже принимать участие в политических процессах. А дело было в том, что учащиеся армянской национальности, заканчивающие в том году учебные заведения Карабаха, категорически отказывались брать выпускные документы образца Азербайджанской ССР, они требовали документы образца Армянской ССР. Создалась в какой-то степени тупиковая ситуация. Для разрешения возникшего кризиса в охваченный волнениями Степанакерт командируется Э. Казарян. Начинаются переговоры с А. Вольским, в результате которых вырабатывается компромиссное решение: выпускникам-армянам предоставляются документы образца Армянской ССР, а азербайджанцам – образца Азербайджанской ССР. Как видно, наш юбиляр преуспел и на дипломатическом поприще.

В 1993 году Э. Казарян становится у руля кафедры «Физики» твердого тела на Физическом факультете ЕГУ. Причем, именно в этот период Э. Казарян формулирует новый класс задач, связанный с исследованием физических процессов в квантовых точках с нетривиальной, в частности, эллипсоидальной геометрией. За основу вычислений был взят метод стационарной адиабатики, обусловленный специфической геометрией исследуемых систем, и поэтому названный Казаряном «геометрической адиабатикой». Как показали дальнейшие события, здесь интуиция также не подвела Эдуарда Мушеговича. Структу-

ры, которые изначально казались исключительно модельными, в последующие годы начали выращивать. И очень важно, что ряд теоретических предположений, сделанных Казаряном совместно с своими учениками, нашли свое экспериментальное подтверждение. За свои научные достижения в 1996 году Эдуард Мушегович избирается в Национальную академию наук Армении.

С 1995 года его назначают проректором ЕГУ по развитию университетского образования.

В 1999 году Эдуарду Мушеговичу предлагают пост министра образования и науки Армении. И опять – напряженная каждодневная работа, теперь уже на благо всей образовательной системы Армении. Особую любовь и тягу Казарян испытывает по отношению к школе. Школа – это очень сложный механизм. Неудачи в системе школьного образования дают о себе знать не сразу, но когда общество начинает осознавать истинную цену этих неудач, то, подобно цунами, очень часто бывает слишком поздно. Поколение воинствующих невежд может все смести на своем пути. Плохая школа не в состоянии воспитать хороших и сознательных граждан. Это отнюдь не трафаретные слова: Карабахскую войну мы выиграли именно благодаря отличной школе! Так вот, Казарян – один из тех немногочисленных мужей, занимавших высокую государственную должность, кто, безусловно, это осознает и делает все возможное, чтобы вывести школу из нынешнего не столь завидного состояния. Он стоял у истоков создания учебно-методического журнала для школьников «Бнагет», им был основан научно-популярный журнал «В мире науки», где армянские ученые популярно представляют достижения науки и техники. Последней его инициативой стало учреждение серии научно-популярных книг для школьников «Библиотека школьника». Финансирование серии книг взял на себя Государственный комитет по науке РА: за короткий срок уже вышло 5 книг этой серии.

Особую роль Эдуард Мушегович сыграл в создании первых армянских учебников по физике для основной и старшей школ. Причем, здесь он ведет работу плечом к плечу со своим близким другом по учебе еще в ЕГУ и МГУ, теперь уже членом-корреспондентом НАН Армении, профессором А. Киракосяном.

После того, как Казарян покинул пост министра, он избирается сначала академиком-секретарем, а позже вице-президентом НАН Армении. В этот период Эдуард Мушегович принимает активное участие в установлении тесных связей между НАН Армении и Южным отделением Российской академии наук. Однако главным достижением Э. Казаряна в первой половине 2000-х годов становится организация на базе Российско-Армянского университета Физико-технического факультета. В этом деле ему активно помогают С. Петросян и ученик Л. Петросян. За короткий срок небольшой команде Эдуарда Мушеговича при всесторонней поддержке руководства университета во главе с ректором А. Дарбиняном удается собрать высококвалифицированный преподавательский состав и организовать обучение по специальностям микро- и наноэлектроника, а также инфокоммуникационные системы. Фактически с нуля создается факультет физико-технического профиля, и, при этом, в рамках данного факультета создаются базовые кафедры в институтах связи и физических исследований (г. Аштарак). С 2012 года совместно с компанией «Синопсис-Армения» открывается направление «Конструирование и технология электронных средств».

«Школа Казаряна» имеет тесные научные контакты со многими российскими и западными университетами и научными центрами. Однако за прошедшие годы особо тесное сотрудничество было установлено с двумя крупными научными центрами России: лабораторией теоретической физики ОИЯИ (Дубна) и кафедрой физики полупроводников и наноэлектроники Санкт-Петербургского политехнического университета им. Петра Великого. Причем, если с дубинцами во гла-

ве с профессором С. Виницким совместные исследования носят исключительно теоретический характер, то с питерцами во главе с профессором Д. Фирсовым ученики Казаряна уже «соприкасаются» с реальным экспериментом.

Адиабатическое описание квантовых наноструктур, изучение оптический электронных, спиновых и электродинамических характеристик квантовых ям, проволок и точек различных геометрий, учет влияния непараболичности закона дисперсии носителей заряда на физические свойства наноструктур, несколько-частичные системы в квантовых точках – вот лишь часть тем исследований, проводимых в научной школе Академика Казаряна. Как результат, Эдуард Мушегович «выпустил» в жизнь более 40 кандидатов наук и 8 докторов.

За свои научные достижения Академик Казарян был удостоен премии Президента РА в области физики (2007г.), Государственной премии РА в области точных и естественных наук (2011г.), ежегодной премии ОИЯИ (2016г.). В 2017 году указом Президента Армении за значительный вклад в деле развития науки и образования, было присвоено почетное звание «Заслуженный деятель науки РА».

Академик Казарян встречает свой 75-летний юбилей с присущим ему юношеским задором, полным сил и творческих начинаний. Нам остается пожелать ему крепкого здоровья и продолжения активной научной и педагогической деятельности во благо РАУ и всей Армении.

Заведующий кафедрой общей физики
и квантовых наноструктур
А.А. Саркисян

УДК 517.958, 530.145.6, 519.632.4

МЕТОД КОНЕЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ РЕШЕНИЯ КРАЕВЫХ ЗАДАЧ ДЛЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ СИСТЕМ

*А.А. Гусев, О. Чулуунбаатар, С.И. Виницкий, А. Гужджа**

Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Россия
*Институт физики, университет им. М. Кюри-Склодовска,
г. Люблин, Польша

АННОТАЦИЯ

Представлена вычислительная схема метода конечных элементов высокого порядка точности решения краевых задач для эллиптического уравнения в частных производных, сохраняющая непрерывность производных приближенного решения. Эффективность алгоритмов и программ демонстрируется на примере точно-решаемых краевых задач на собственные значения для треугольной мембраны.

Ключевые слова: эллиптические уравнения в частных производных, краевые задачи на собственные значения, метод конечных элементов, интерполяционные полиномы.

Введение

В работах [1,2] разработаны символьно-численные алгоритмы и программы решения краевых задач для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка методом конечных элементов (МКЭ) высокого порядка точности с использованием интерпо-

ляционных полиномов Эрмита (ИПЭ). Такая реализация МКЭ, в отличие от традиционной, с использованием интерполяционных полиномов Лагранжа (ИПЛ), обеспечивает непрерывность производных до заданного порядка приближенного решения не только на конечных элементах сетки, но и на границах конечных элементов [3], то есть сохранение тока носителей заряда в квантово-размерных полупроводниковых системах или тока вероятности в квантовомеханических задачах рассеяния [4].

В настоящей работе представлена вычислительная схема МКЭ решения краевой задачи на собственные значения для эллиптического уравнения в частных производных с использованием ИПЭ. Кусочно-непрерывный базис генерируется с помощью ИПЭ и обеспечивает непрерывность не только приближенного решения, но и его производных до заданного порядка в зависимости от гладкости переменных коэффициентов уравнения и границы области. Эффективность алгоритмов и программ демонстрируется на примере точно-решаемых краевых задач на собственные значения для треугольной мембраны.

Постановка задачи

Рассмотрим самосопряженную краевую задачу для эллиптического дифференциального уравнения второго порядка:

$$\left(-\frac{1}{g_0(z)}\sum_{i,j=1}^{d}\frac{\partial}{\partial z_i}g_{ij}(z)\frac{\partial}{\partial z_j}+V(z)-E\right)\Phi(z)=0. \qquad (1)$$

Для коэффициентов главной части (1) выполняется условие равномерной эллиптичности в ограниченной области $z=(z_1,...,z_d)\in\Omega$ евклидова пространства $\mathbb{R}^d$, т.е. существуют константы $\nu>0, \mu>0$, такие, что для любых вещественных параметрах ξ_i выполняется

неравенство $\mu\sum_{i=1}^{d}\xi_i^2 \le \sum_{i,j=1}^{d} g_{ij}(z)\xi_i\xi_j \le \nu\sum_{i=1}^{d}\xi_i^2$. Также предполагается, что $g_0(z)>0$, $g_{ij}(z)=g_{ji}(z)$, и $V(z)$ – функции, непрерывные вместе со своими обобщенными производными до заданного порядка в области, $z\in\bar{\Omega}=\Omega\cup\partial\Omega\subset\mathbb{R}^d$, с кусочно-полиномиальной границей $S=\partial\Omega\subset\mathbb{R}^{d-1}$, обеспечивающие существование нетривиальных решений, подчиненных граничным условиям первого (I) или второго (II) рода [5,6]

$$(I):\Phi(z)|_S=0,\quad (II):\frac{\partial\Phi(z)}{\partial\hat{n}_D}=\sum_{i,j=1}^{d}(\hat{n},\hat{e}_i)g_{ij}(z)\frac{\partial\Phi(z)}{\partial z_j}\Bigg|_S=0, \qquad (2)$$

где $\hat{n}$ – внешняя нормаль к границе $S=\partial\Omega$ области Ω, $\hat{e}_i$ – единичный вектор вектора $z=\sum_{i=1}^{d}\hat{e}_i z_i$, $(\hat{n},\hat{e}_i)$ – скалярное произведение в $\mathbb{R}^d$.

Для краевой задачи дискретного спектра (1)-(2) собственные функции $\Phi_m(z)$ из пространства Соболева $W_2^{s\ge1}(\Omega)$, $\Phi_m(z)\in W_2^{s\ge1}(\Omega)$, соответствующие собственным значениям энергии $E_1\le E_2\ldots\le E_m\le\ldots$, удовлетворяют условиям нормировки и ортогональности

$$\int_\Omega g_0(z)\bar{\Phi}_m(z)\Phi_{m'}(z)dz=\delta_{mm'}\ . \qquad (3)$$

Решение МКЭ краевых задач (1)–(3) сводится к нахождению стационарных точек симметричного вариационного функционала [6,7]

$$\Xi(\Phi_m,E_m,z)=\int_\Omega\left(\sum_{i,j=1}^{d}g_{ij}(z)\frac{\partial\bar{\Phi}_m(z)}{\partial z_i}\frac{\partial\Phi_m(z)}{\partial z_j}+g_0(z)\bar{\Phi}_m(z)(V(z)-E_m)\Phi_m(z)\right)dz. \qquad (4)$$

Базисы лагранжевых и эрмитовых конечных элементов

1. В МКЭ область $\Omega=\Omega_h=\bigcup_{q=1}^{Q}\Delta_q$, заданная в виде многогранника, покрывается конечными элементами, в данном случае симплек-

сами Δ_q с $d+1$ вершинами $\hat{z}_j=(\hat{z}_{j1},...,\hat{z}_{jd})$ при $j=0,...,d$. Каждое ребро симплекса Δ_q разбиваем на p равных частей и проводим семейства параллельных гиперплоскостей, нумеруя каждую целым числом от 0 до p, начиная от соответствующей грани, например, как показано при $d=2$ на Рис. 1 (см. также [8]. С. 220). Точки A_r пересечения гиперплоскостей нумеруем наборами целых чисел $[n_0,...,n_d]$, $n_i \ge 0$, $n_0+...+n_d=p$. Координаты узловой точки $A_r \in \Delta_q$ определяются по формуле $\xi_r=(\xi_{r1},...,\xi_{rd})=\sum_{j=0}^{d}(\hat{z}_{j1},...,\hat{z}_{jd})\,n_j/p$ через координаты вершин $\hat{z}_j=(\hat{z}_{j1},...,\hat{z}_{jd})$.

При реализации МКЭ расчеты удобно проводить в локальных координатах z', связанных с исходными координатами z аффинным преобразованием, $z_j=\hat{z}_{0j}+\sum_{i=1}^{d}(\hat{z}_{ij}-\hat{z}_{0j})z'_i$, $j=1,...,d$, в которых координаты вершин симплекса Δ следующие $\hat{z}'_j=(\hat{z}'_{j1},...,\hat{z}'_{jd})$, $\hat{z}'_{jj'}=\delta_{jj'}$. Тогда ИПЛ $\varphi_r(z')$, равные единице в узловой точке A_r с координатами $\xi'_r=(\xi'_{r1},...,\xi'_{rd})$, характеризуемой числами $[n_0,...,n_d]$, и нулю в остальных точках $\xi'_{r'}=(\xi'_{r'1},...,\xi'_{r'd})$, т.е., $\varphi_r(\xi_{r'})=\delta_{rr'}$ определяются по формуле:

$$\varphi_r(z')\equiv\varphi_r((z'_1,...,z'_d))=\left(\prod_{j=1}^{d}\prod_{n'_j=0}^{n_j-1}\frac{z'_j-n'_j/p}{n_j/p-n'_j/p}\right)\left(\prod_{n'_0=0}^{n_0-1}\frac{1-z'_1-...-z'_d-n'_0/p}{n_0/p-n'_0/p}\right). \quad (5)$$

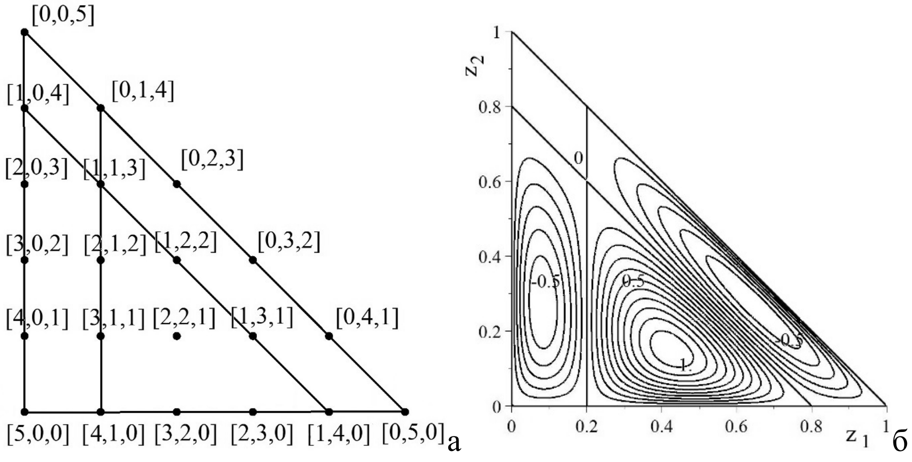


Рис. 1.

а. Нумерация узлов A_r, $r = 1,...,(p+1)(p+2)/2$, наборами чисел $[n_0, n_1, n_2]$ треугольника Δ для схемы с ИПЛ пятого порядка $p' = p = 5$ при $d = 2$. Линии (пять пересекающихся прямых) – нули ИПЛ $\varphi_{14}(z')$ (5), равного единице в точке, пронумерованной тройкой чисел $[n_0, n_1, n_2] = [2,2,1]$.
б. Изолинии ИПЛ $\varphi_{14}(z')$.

Приравнивание числителей в (5) нулю дает семейства уравнений прямых, направленных «горизонтально», «вертикально» и «наклонно» в локальной системе координат (z'_1, z'_2), которая связана аффинным преобразованием с семейством «наклонно» расположенных прямых элемента Δ_q. На Рис. 1 дан пример иллюстрирующий построение ИПЛ при $d = 2$, $r, r' = 1,...,(p+1)(p+2)/2$, $p = 5$ на элементе Δ.

Кусочно-полиномиальные функции $P_l(z)$, формирующие базис $\{P_l(z)\}_{l=1}^{P}$, которые строятся путем сшивки ИПЛ $\varphi_r(z)$ на конечных элементах Δ_q: $P_l(z) = \{\varphi_l(z), A_l \in \Delta_q; 0, A_l \notin \Delta_q\}$, $z \in \Omega_h = \bigcup_{q=1}^{Q} \Delta_q$, яв-

ляются непрерывными функциями, но их производные терпят разрывы на границах элементов Δ_q .

2. Построим интерполяционные полиномы Эрмита порядка p', сшивкой которых можно получить кусочно-полиномиальные функции $P_l(z)$, сохраняющие непрерывность производных до заданного порядка κ'.

Для построения ИПЭ в локальных координатах z' введем набор вспомогательных полиномов (ВП1):

$$\varphi_r^{\kappa_1,\ldots,\kappa_d}(\xi'_{r'}) = \delta_{rr'}\delta_{\kappa_1 0}\ldots\delta_{\kappa_d 0}, \quad \left.\frac{\partial^{\mu_1+\ldots+\mu_d}\varphi_r^{\kappa_1,\ldots,\kappa_d}(z')}{\partial z_1'^{\mu_1}\ldots z_d'^{\mu_d}}\right|_{z'=\xi'_{r'}} = \delta_{rr'}\delta_{\kappa_1\mu_1}\ldots\delta_{\kappa_d\mu_d}, \tag{6}$$
$$0 \le \kappa_1+\ldots+\kappa_d \le \kappa_{\max}-1, \quad 0 \le \mu_1+\ldots+\mu_d \le \kappa_{\max}-1,$$

с заданными значениями не только функций, но и их производных до порядка $\kappa_{\max}-1$ в узловых точках ξ'_r. ВП1 даются выражениями

$$\varphi_r^{\kappa_1,\ldots,\kappa_d}(z') = w_r(z')\sum_{\mu_1,\ldots,\mu_d} \mathrm{a}^{\kappa_1,\ldots,\kappa_d,\mu_1,\ldots,\mu_d}(\mathrm{z}'_1-\xi'_{\mathrm{r}1})^{\mu_1}\times\ \ldots\times(z'_1-\xi'_{\mathrm{rd}})^{\mu_\mathrm{d}},$$
$$w_r(z') = \left(\prod_{j=1}^{d}\prod_{n'_j=0}^{n_j-1}\frac{(z'_j-n'_j/p)^{\kappa_{\max}}}{(n_j/p-n'_j/p)^{\kappa_{\max}}}\right)\left(\prod_{n'_0=0}^{n_0-1}\frac{(1-z'_1-\ldots-z'_d-n'_0/p)^{\kappa_{\max}}}{(n_0/p-n'_0/p)^{\kappa_{\max}}}\right), \tag{6'}$$

где коэффициенты $\mathrm{a}^{\kappa_1,\ldots,\kappa_d,\mu_1,\ldots,\mu_d}$ вычисляются из рекуррентных соотношений, полученных в результате подстановки (6’) в условия (6). При $d>1$ и $\kappa_{\max}>1$, число $N_{\kappa_{\max}p'}$ ИПЭ степени p' и кратности узлов $\kappa_{\max}$ меньше числа полиномов $N_{1p'}$, формирующих базис в пространстве полиномов степени p' (например, ИПЛ из (5)), т.е. полиномы, удовлетворяющие (6), определены неоднозначно.

3. Для однозначного определения полиномиального базиса введём $K=N_{1p'}-N_{\kappa_{\max}p'}$ вспомогательных полиномов $Q_s(z)$ двух

типов: ВП2 и ВП3, линейно-независимых от ВП1 и удовлетворяющих условиям в узловых точках $z' = \xi'_r$:

$$Q_s(\xi'_r) = 0, \quad \left.\frac{\partial^{\mu_1+\ldots+\mu_d} Q_s(z)}{\partial z_1^{\mu_1} \ldots z_d^{\mu_d}}\right|_{z=\xi'_r} = 0, \quad s = 1,\ldots,K. \tag{7}$$

Отметим, что для обеспечения непрерывности производных часть полиномов, называемых ВП2, должны удовлетворять условию

$$\left.\frac{\partial^k Q_{s'}(z)}{\partial n^k}\right|_{z=\zeta_s} = \delta_{ss'}\delta_{kk'}, \ s = 1,\ldots,K, s' = 1,\ldots,T_1(\kappa'), k = k(s'), \tag{8}$$

где n – вектор в направлении внутренней нормали в некоторых выбранных точках ζ_s граней (размерности от 1 до $d-1$) d-мерного симплекса Δ_q в исходной системе координат, связанной аффинным преобразованием с соответствующими точками ζ'_s в локальной системой координат симплекса Δ, не совпадающими с узловыми точками ξ'_r.

Вычисляя число $T_1(\kappa')$ независимых параметров, требуемых для обеспечения непрерывности производных до порядка κ', определяем его максимальное значение, которое можно получить для схем с заданными p и $\kappa_{\max}$, и, соответственно, $T_1(\kappa')$ дополнительных условий (8).

Остается $T_2 = K - T_1(\kappa')$ независимых параметров и, соответственно, добавляется T_2 дополнительных условий, необходимых для однозначного определения полиномов, называемых ВП3,

$$Q_{s'}(\zeta'_s) = \delta_{ss'}, \ s = 1,\ldots,K, s' = T_1(\kappa') + 1,\ldots,K, \tag{9}$$

где ζ'_s– некоторые выбранные точки, не принадлежащие граням симплекса Δ, и не совпадающие с узловыми точками ξ'_r.

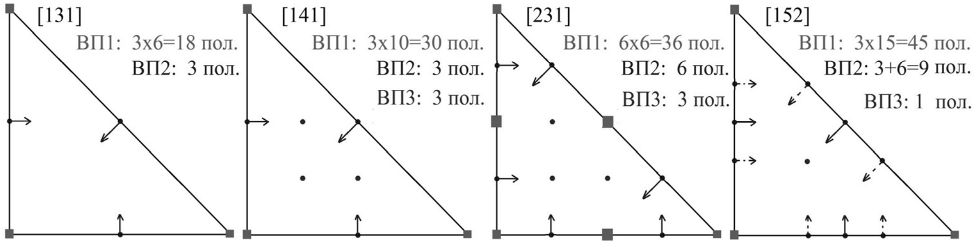


Рис. 2.

Схематическое изображение условий (6)–(9), из которых строятся базисные ИПЭ $[p\,\kappa_{\max}\kappa']$. Квадраты: точки ξ'_r в которых фиксируются значения функций и их производных, сплошные (пунктирные) стрелки: с началом в точках ζ_s, в которых фиксируются значения первой (второй) производной по направлению нормали в исходных координатах, соответственно, кружки: точки ζ'_s, в которых фиксируются значения функций.

Таблица

Характеристики полиномиального базиса при d=2.

	$[p\,\kappa_{\max}\kappa']$	[131]	[141]	[231]	[152]
p'	$\kappa_{\max}(p+1)-1$	5	7	8	9
$N_{\kappa_{\max}p'}$	$(p+1)(p+2)\kappa_{\max}(\kappa_{\max}+1)/4$	18	30	36	45
$N_{1p'}$	$(p'+1)(p'+2)/2$	21	36	45	55
K	$p(p+1)(\kappa_{\max}-1)\kappa_{\max}/4$	3	6	9	10
$T_1(1)$	$3p$	3	3	6	3
$T_1(2)$	$9p$	9	9	18	9
Ограничение на порядок производных κ': $3p\kappa'(\kappa'+1)/2\le K$					

Вспомогательные полиномы ВП2 и ВП3 даются выражением $z->z'$

$$Q_s(z) = \mathrm{z}_1^{\mathrm{k}_1}...\mathrm{z}_\mathrm{d}^{\mathrm{k}_\mathrm{d}}(1-\mathrm{z}_1-...-\mathrm{z}_\mathrm{d})^{\mathrm{k}_0}\sum_{\mu_1,...,\mu_d}\mathrm{b}^{s,\mu_1,...,\mu_d}\mathrm{z}_1{}^{\mu_1}\times...\times\mathrm{z}_\mathrm{d}{}^{\mu_\mathrm{d}}, \qquad (10)$$

где $k_t = 1$, если точка ζ_s, в которой заданы дополнительные условия (8) или (9), лежит на соответствующей грани симплекса, и $k_t = \kappa'$в противном случае. Коэффициенты $\mathrm{b}^{s,\mu_1,...,\mu_d}$ определяются из системы линейных уравнений, полученных в результате подстановки (10) в условия (7)–(9).

В результате получаем набор базисных ИПЭ $\varphi_l(z) = \{\,\hat{\varphi}_r^\kappa(z),\ Q_s(z)\}$, составленных из полиномов $Q_s(z)$ типа ВП2 и ВП3 и полиномов $\hat{\varphi}_r^\kappa(z)$ типа ВП1:

$$\hat{\varphi}_r^\kappa(z) = \varphi_l^\kappa(z) - \sum_{i=1}^{K} c_{\kappa r;s} Q_s(z),$$

где $c_{\kappa r;s} = \left.\dfrac{\partial^k \varphi_r^\kappa(z)}{\partial n^k}\right|_{z=\zeta_s}$, для $Q_i(z)$ из ВП2 и $c_{\kappa r;s} = \varphi_r^\kappa(\zeta_s)$, для $Q_i(z)$ из ВП3.

4. Например, при $d = 2$ степень p' полинома по тангенциальной переменной t на границе треугольника совпадает со степенью полинома двух переменных, и для его однозначного определения требуется $p'+1$ параметр. Производная порядка κ' по нормальной переменной на границе будет полином степени $p'-\kappa'$, и для ее однозначного определения потребуется $p'-\kappa'+1$ параметров. Однако она определена только $\mathrm{p'}\text{-}\kappa'(\mathrm{p}+1)$ параметрами: смешанными производными фиксированного порядка κ' по нормальной переменной и порядка от 0 до $\kappa_{\max} - \kappa' - 1$ по тангенциальной переменной, т.е.

$$\frac{\partial^{\kappa'}Q_{s'}(z)}{\partial n^{\kappa'}}, \frac{\partial^{\kappa'+1}Q_{s'}(z)}{\partial n^{\kappa'}\partial t}, \frac{\partial^{\kappa'+2}Q_{s'}(z)}{\partial n^{\kappa'}\partial t^{2}}, \ldots, \frac{\partial^{\kappa_{\max}-1}Q_{s'}(z)}{\partial n^{\kappa'}\partial t^{\kappa_{\max}-\kappa'-1}}.$$

Схематическое изображение реализации условий (6)–(9), из которых строятся базисные ИПЭ, показано при *d=2* на Рис 2. Характеристики полиномиального базиса из ИПЭ на элементе Δ при d=2 приведены в Таблице.

5. Кусочно-полиномиальные функции $P_l(z)$ с непрерывными производными до порядка κ', формирующие базис $\{P_l(z)\}_{l=1}^{N}$, строятся путем сшивки полиномов $\varphi_l(z)=\{\hat{\varphi}_r^{\kappa}(z), Q_s(z)\}$ на конечных элементах Δ_q:

$$P_l(z)=\{\pm\varphi_l(z), A_l\in\Delta_q; 0, A_l\notin\Delta_q\},\ z\in\Omega_h=\bigcup_{q=1}^{Q}\Delta_q,$$

где знак ‘–’ может появиться только для ВП2, когда нужно сшить нормальные производные нечетного порядка.

Разложение искомого решения $\Phi_m(z)$ задачи (1)–(3) по базису кусочно-полиномиальных функций $P_l(z)$, $\Phi_m^h(z)=\sum_{l=1}^{N}P_l(z)\Phi_{lm}^h$, и подстановка его в вариационный функционал (4) приводит к обобщенной алгебраической задаче на собственные значения, $(A-BE_m^h)\Phi_m^h=0$, которая решается стандартным методом (см., например, [7]). Элементы матриц жесткости A и матрицы масс B содержат интегралы типа (4), которые вычисляются в исходных координатах z на элементах Δ_q в области $\Omega_h=\bigcup_{q=1}^{Q}\Delta_q$, пересчитанные в локальные координаты z' на элементе Δ.

Результаты и обсуждение

В качестве примера приведем результаты решения задачи дискретного спектра (1)–(3) при $d=2$, $g_0(z)=1$, $g_{ij}(z)=1$ и $V(z)=0$ в

области $\Omega_h = \bigcup_{q=1}^{Q} \Delta_q$ в виде равностороннего треугольника со стороной $4\pi/3$ с граничными условиями второго типа (II), который разбит на $Q = n^2$ равносторонних треугольников Δ_q со стороной $h = 4\pi/3n$. Собственные значения этой задачи с вырожденным спектром – целые числа $E_m = m_1^2 + m_2^2 + m_1 m_2 = 0,1,1,3,4,4,7,7,\ldots$ [9].

На Рис. 3 представлены профиль четвертой собственной функции Φ_4^h и погрешности $\Delta E_4 = E_4^h - E_4$ собственного значения E_4^h в зависимости от числа элементов n и от длины вектора N для схем с ИПЛ от пятого до девятого порядка точности, отмеченные метками $[p, \kappa_{\max}, \kappa']$ =[510], ..., [910], для схем с ИПЭ, $p' = 5$, 7 и 8 порядка точности, сохраняющие первую производную приближенного решения и отмеченные метками [131], [141] и [231], и схемы девятого порядка точности [152], сохраняющей вторую производную приближенного решения. Описание характеристик представленных схем с ИПЭ дано в Таблице. Как видно из Рис. 3, погрешности собственного значения E_4^h схем МКЭ одного порядка $p' = \kappa_{\max}(p+1) - 1$ примерно одинаковые. Однако для достижения заданной точности приближенного решения в схемах МКЭ с ИПЭ, обеспечивающих непрерывность первой и второй производных приближённого решения, используются матрицы меньшей размерности, соответствующие длине вектора N в 1.5–2 раза меньшей, чем для схем с ИПЛ, обеспечивающих только непрерывность приближенного решения.

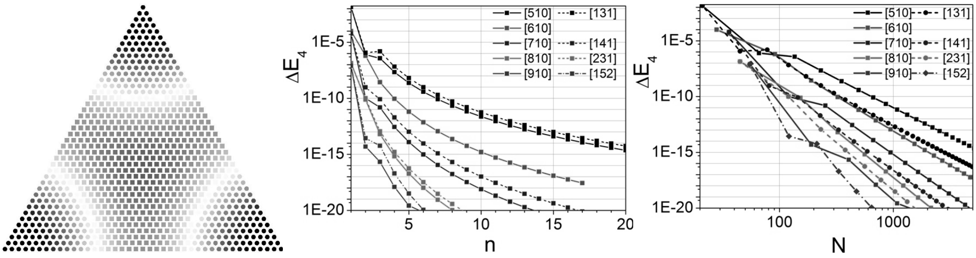


Рис. 3.

Профиль четвертой собственной функции Φ_4^h и зависимости погрешности $\Delta E_4 = E_4^h - E_4$ собственного значения E_4^h. Пояснение в тексте.

Заключение

Предложена вычислительная схема МКЭ высокого порядка точности решения задачи на собственные значения для эллиптического уравнения в частных производных в двумерной области, обеспечивающая непрерывность не только приближенного решения, но и его производных до заданного порядка. На примере точно-решаемой краевой задач для треугольной мембраны показано, что для достижения заданной точности приближенного решения, для схем с МКЭ с ИПЭ, обеспечивающих непрерывность первой и второй производных приближённого решения используются матрицы меньшей размерности, соответствующие длине вектора N в 1.5–2 раза меньшей, чем для схем с ИПЛ, сохраняющих на границах конечных элементов только непрерывность приближенного решения.

Вычислительные схемы МКЭ ориентированы на расчеты спектральных и оптических характеристик квантовых точек и других квантовомеханических систем. Реализация МКЭ с ИПЭ в конфигурационном пространстве $d \geq 2$ будет дана в последующих работах.

Работа поддержана РФФИ (грант 16-01-00080) и программой Боголюбов-Инфельд (ОИЯИ-Польша).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Gusev A.A., Chuluunbaatar O., Vinitsky S.I., Derbov V.L., Gozdz A., Hai L.L., Rostovtsev V.A.* Lect. Notes Comp. Sci. 8660 (2014), 138.

2. *Gusev A.A., Hai L.L., Chuluunbaatar O., Vinitsky S.I.* KANTBP 4M: Program for Solving Boundary Problems of the System of Ordinary Second Order Differential Equations.

http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m/indexe.html

3. *Сьярле Ф.* Метод конечных элементов для эллиптических задач. М.: Мир, 1980.

4. *Ramdas Ram-Mohan L.* Finite Element and Boundary Element Aplications in Quantum Mechanics, New York, Oxford Univ. Press, 2002.

5. *Ладыженская О.А*. Краевые задачи математической физики, М.: Наука, 1973.

6. *Шайдуров В.В.* Многосеточные методы конечных элементов. М.: Наука, 1989.

7. *Бате К., Вилсон Е.* Численные методы анализа и метод конечных элементов. М.: Стройиздат, 1982.

8. *Бахвалов Н.С., Жидков Н.П., Кобельков Г.М.* Численные методы. М.: Наука, 1987.

9. *Mc Cartin B.J.* Laplacian Eigenstructure of the Equilateral Triangle. Ruse, Bulgary: Hikari Ltd, 2011.

FINITE ELEMENT METHOD FOR SOLVING BOUNDARY-VALUE PROBLEMS OF QUANTUM MECHANICAL SYSTEMS

A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitsky, A. Góźdź*

Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Russia
*Institute of Physics, University of M. Curie-Sklodowska, Lublin, Poland.

ABSTRACT

The computational scheme of Finite Element Method of high order accuracy for solving the boundary value problem for elliptic partial differential equation, conversing a continuity of derivatives of approximate solution is presented.

The efficiency of algorithm and program is demonstrated on an example of exact-solvable boundary-value problem for triangular membrane.

Keywords: elliptic partial differential equations, boundary-value problem, finite element method, interpolation polynomials.

SPASER ACTION AND MODE MIXING IN PLASMONIC SYSTEMS WITH GAIN

L.S. Petrosyan, T.V. Shahbazyan

Department of Physics, Jackson State University, Jackson MS 39217 USA
PACS: 78.67.Bf, 73.20.Mf, 33.20.Fb, 33.50.-j

We study the effect of off-resonance plasmon modes on spaser action in plasmonic systems with gain. We show that mode mixing originates from inhomogeneity of gain distribution near the metal surface and leads to an upward shift of spaser frequency and population inversion threshold. This effect is similar, albeit significantly weaker, to quenching of plasmon-enhanced fluorescence of a single emitter near metal nanostructure due to excitation of nonresonant modes with wide spectral band. We also show that spaser quenching is suppressed for large gain concentrations, and establish a simple criteria for quenching onset, which we support by numerical calculations for spherical geometry.

I. Introduction

The prediction of plasmonic laser (spaser) [1–3] and its experimental realization in various systems [4–14] have been among the highlights in the rapidly developing field of plasmonics during past decade [15]. First observed in gold nanoparticles (NP) coated by dye-doped silica shells [4], spaser action was reported in hybrid plasmonic waveguides [5], semiconductor quantum dots on metal film [6,12], plasmonicnanocavities and nanocavity arrays [7–10,13,14], metallic NP and nanorods [4,11], and more recently, carbon-based structures [16,17] and hyperbolic materials

[18]. Small spaser size well below the diffraction limit gives rise to wealth of promising applications [19].

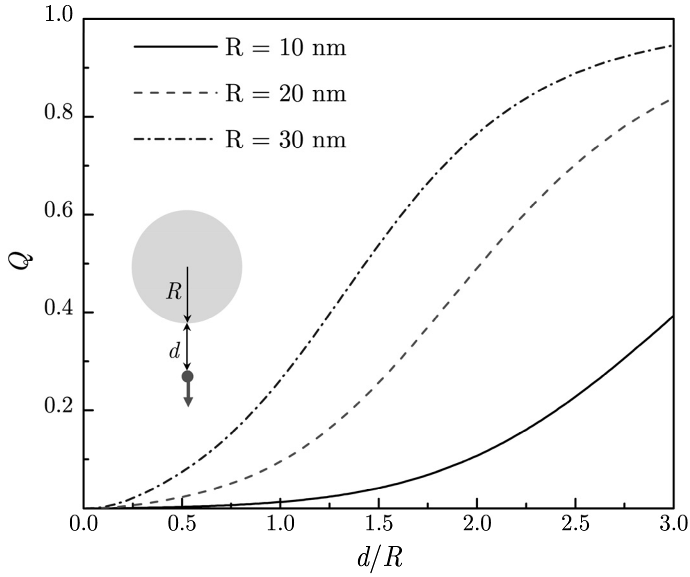


FIG. 1. Fluorescence quantum efficiency for a QE near spherical Au NP is shown vs. QE-NP distance for several NP sizes.

The spaser feedback mechanism is based on energy transfer (ET) between quantum emitters (QE), constituting gain medium, and resonant plasmon mode. Even though a metal nanostructure usually possesses discrete spectrum of localized plasmon modes, e.g., characterized by angular momentum l for spherical systems, the QE coupling to *nonresonant* modes with well separated frequencies is typically considered sufficiently weak to be neglected. However, this is a good approximation for high quality cavity modes, while plasmon resonances are characterized by much broader lineshape due to large Ohmic losses in metal, so that a significant fraction of QE energy is transferred to nonresonant modes at small QE distances to the metal surface, where the coupling to nonresonant

modes is large [20-23]. During past decade, numerous experiments reported plasmon-enhanced fluorescence of dye molecules or semiconductor quantum dots near metal NPs which, however, was quenched as QEs moved closer to the NP surface [24-30]. Fluorescence quenching in plasmonic systems is best illustrated by distance dependency of quantum efficiency $Q = \Gamma_r / (\Gamma_r + \Gamma_{nr})$ of a radiating dipole with frequency tuned to the dipole plasmon resonance in spherical metal NP (see Fig. 1). Here Γ_r is plasmon-enhanced radiative decay rate and Γ_{nr} is nonradiative decay rate due to QE coupling to high-l nonresonant modes (see below for detail). With decreasing QE-NP distance d, nonradiative QE decay into nonresonant modes dominates, so that, for distances comparable to NP radius R, the quantum efficiency is low.

In plasmonic systems with gain, the effect of gain coupling to nonresonant modes is twofold. First, QEs coupling to higher-order plasmons (with higher frequencies) should lead to upward shift of spaser frequency, and, second, the energy transfer (ET) from QEs to nonresonant modes can interfere with the feedback mechanism, resulting in higher population inversion threshold. Both effects have increasingly negative impact on on spaser action as the (average) distance between QEs and the metal surface is reduced, which raises the issue of *spaser quenching* for substantially close gain-metal proximity. While spaser action has been modeled in a number of specific systems [3,31–35],little work has been done on the role of nonresonant modes. A recent numerical study involving core-shell NP indicated limited impact of nonresonant modes on the spaser action [36]. However, no comprehensive study on the role of nonresonant modes in spaser action has so far been carried out.

The goal of this paper is to develop an analytical model for plasmonic systems with gain that includes gain coupling to nonresonant modes, and to establish criteria for spaser quenching. We show that inhomogeneity of gain

distribution near the metal surface gives rise to plasmon mode mixing leading to increase of spaser frequency and population and population inversion threshold. However, with increasing gain concentration, role of nonresonant modes in spaser action is reduced and their overall effectis much weaker in plasmon-enhanced fluorescence. For NP-based spasers, we obtain a simple condition for spaser quenching onset, which we support by numerical calculations.

II. Pumped quantum emitters interacting with a metal nanoparticle

We consider a thin layer of M QEs randomly distributed on top of a spherical core-shell NP with metal core of radius R and a dielectric shell of uniform thickness d. Within semiclassical approach, electromagnetic fields are treated classically, while QEs are described by pumped two-level systems located at $\mathbf{r}_j$ with excitation frequency ω_{12} between energy levels 1 and 2. Each QE is characterized by polarization $\rho_j \equiv \rho_{12}^{(j)}$ and occupation $n_j \equiv \rho_{22}^{(j)} - \rho_{11}^{(j)}$, where $\rho_{ab}^{(j)}$ ($a,b=1,2$) is the density matrix for jth QE. The ensemble population inversion is $N=\sum_j n_j$. In the rotating wave approximation, the steady-state dynamics of QEs coupled to alternating electric field $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r})e^{-i\omega t}$ is described by the standard Maxwell-Bloch equations

$$\left(\omega-\omega_{21}+i/\tau_2\right)\rho_j = \frac{\mu}{\hbar} n_j\, \boldsymbol{e}_j\cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}_j), \tag{1}$$

$$n_j - \bar{n} = -\frac{4\mu\tau_1}{\hbar}\,\mathrm{Im}\left[\rho_j\, \boldsymbol{e}_j\cdot \boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}_j)\right],$$

where τ_2 and τ_1 are time constants characterizing polarization and population relaxation, μ and $\boldsymbol{e}_j$ are, respectively, the QE dipole matrix

element and orientation, and $\bar{n}$ is the average population inversion per QE due to the pump. The local field $\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}_j)$ is generated by all QEs' dipole moments $\boldsymbol{p}_j = \mu \boldsymbol{e}_j \rho_j$ and, within semiclassical approach, has the form

$$\boldsymbol{\mathcal{E}}(\boldsymbol{r}_j) = \frac{4\pi\omega^2}{c^2} \sum_k \bar{\mathbf{G}}(\omega; \boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{r}_k) \cdot \boldsymbol{p}_k, \tag{2}$$

where $\bar{\mathbf{G}}(\omega; \boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ is the electromagnetic Green dyadic in the presence of metal nanostructure and c is the speed of light. Using Eq. (2) to eliminate the electric field, the system (1) takes the form

$$\sum_{k=1}^{M} \left[\left(\omega - \omega_{21} + \frac{i}{\tau_2} \right) \delta_{jk} - \frac{\mu^2}{\hbar} n_j D_{jk} \right] \rho_j = 0,$$

$$n_j - \bar{n} + \frac{4\tau_1 \mu^2}{\hbar} \mathrm{Im} \sum_{k=1}^{M} \left(\rho_j^* D_{jk} \rho_j \right) = 0, \tag{3}$$

where δ_{jk} is Kronecker symbol and $D_{jk}(\omega)$ is a frequency-dependent coupling matrix in position space,

$$D_{jk}(\omega) = \frac{4\pi\omega^2}{c^2} e_j \cdot \bar{\mathbf{G}}(\omega; \boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{r}_k) \cdot \boldsymbol{e}_k. \tag{4}$$

Below the diffraction limit, the Green dyadic can be replaced by its near-field limit, and the coupling matrix (4) represents a sum of direct and plasmon terms, $D_{jk} = D_{jk}^0 + D_{jk}^p$, which, for spherical geometry, are given by multipole expansions [22,23]

$$D_{jk}^0 = -\sum_{lm} \left[\psi_{lm}^{(j)} \chi_{lm}^{(k)*} \theta_{jk} + \chi_{lm}^{(j)} \psi_{lm}^{(k)*} \theta_{kj} \right],$$

$$D_{jk}^p = \sum_{lm} \alpha_l \psi_{lm}^{(j)} \psi_{lm}^{(k)*}, \tag{5}$$

where l and m are the polar and azimuthal numbers, respectively, and $\theta_{jk} \equiv \theta(r_j - r_k)$ is the step-function. Here, $\alpha_l(\omega)$ is l-pole polarizability for a spherical NP in a medium with dielectric constant ε_d,

$$\alpha_l(\omega) = \frac{R^{2l+1}(\varepsilon - \varepsilon_d)}{\varepsilon + (1 + l^{-1})\varepsilon_d}, \tag{6}$$

where $\varepsilon(\omega)$ is the metal dielectric function, and the basis functions are given by

$$\chi_{lm}^{(j)} = C_l e_j \cdot \nabla_j \left[r_j^l Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}_j) \right], \quad \psi_{lm}^{(j)} = C_l e_j \cdot \nabla_j \left[\frac{Y_{lm}(\hat{\boldsymbol{r}}_j)}{r_j^{l+1}} \right], \tag{7}$$

where $C_l = \sqrt{4\pi / (2l+1)}$ is normalization coefficient and $Y_{lm}(\hat{r})$ are the spherical harmonics. The basis functions satisfy orthogonality relations

$$< \chi_{lm}^{(j)*} \chi_{l'm'}^{(j)} >= \frac{l}{3} r_j^{2l-2} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \tag{8}$$

$$< \psi_{lm}^{(j)*} \psi_{l'm'}^{(j)} >= \frac{1}{3} \frac{l+1}{r_j^{2l+4}} \delta_{ll'} \delta_{mm'}, < \chi_{lm}^{(j)*} \psi_{l'm'}^{(j)} >= 0,$$

where brackets stand for angular and orientational averaging. Note that, for QEs with random dipole orientations and uniformly distributed in the shell, the direct term D_{jk}^0 in system (5) vanishes on average, so we keep only the plasmon term D_{jk}^p in the following.

III. Collective modes of quantum emitters and spaser condition

Within semiclassical approach, the first (homogeneous) equation in the system (3) determines the spaser condition. We now transform it from individual QE representation to collective mode representation by introducing collective polarizations as

$$\rho_\lambda = \sum_{j=1}^{M} \psi_\lambda^{(j)*} \rho_j, \tag{9}$$

where $\lambda = (lm)$ is composite mode index. Keeping only the plasmon term D^{p}_{jk} in the coupling matrix, multiplying the first equation by $\psi^{(j)*}_{\lambda}$ and summing over j, the system (3) takes the form

$$\left(\omega - \omega_{21} + i/\tau_2\right)\rho_\lambda - \sum_{\lambda'} S_{\lambda\lambda'}\alpha_{\lambda'}\rho_{\lambda'} = 0,$$

$$N - \bar{N} + \frac{4\tau_1\mu^2}{\hbar}\sum_{\lambda}\alpha''_{\lambda}(\omega)\left|\rho_\lambda\right|^2 = 0, \tag{10}$$

where $N = \sum_j n_j$ is gain population inversion, $\bar{N} = \bar{n}M$ is that due to the pump, and

$$S_{\lambda\lambda'} = \frac{\mu^2}{\hbar}\sum_{j=1}^{M}\psi^{(j)*}_{\lambda} n_j \psi^{(j)}_{\lambda'} \tag{11}$$

is the mode coupling matrix.

Single mode approximation

Let us perform angular and orientational averaging in system (10). In the leading order in $1/M$, this is done by replacing the mode coupling matrix S with its average using relations (8),

$$< S_{\lambda\lambda'} >= s_l \delta_{ll'}\delta_{mm'}, s_l = \frac{l+1}{3}\frac{\mu^2}{\hbar}\sum_j \frac{n_j}{r_j^{2l+4}}, \tag{12}$$

yielding the consistency condition for each mode

$$\omega - \omega_{21} + i/\tau_2 = s_l \alpha_l(\omega). \tag{13}$$

The real and imaginary parts of Eq. (13) determine, respectively, the spaser frequency and threshold population inversion. Note that since Eq. (13) are independent of azimuthal number m, each l-mode is $(2l+1)$-fold degenerate.

Assume now that gain molecules are uniformly distributed in a thin layer at approximately equal distance d from the metal NP surface (e.g., on top of dielectric shell). Then we obtain from (13)the standard spaser frequencyand for $|\omega_l - \omega_{21}|\tau_l \ll 1$, the population inversion *threshold* N_0

$$\omega_0 = \frac{\tau_l\omega_l + \tau_2\omega_{21}}{\tau_l + \tau_2}, \quad \frac{\mu^2\tau_2}{\hbar}\frac{(2l+1)(l+1)}{3l\varepsilon''(\omega_l)}\frac{N_0 R^{2l+1}}{(R+d)^{2l+4}} = 1. \qquad (14)$$

Note that N_0 increases exponentially for large-l modes.

IV. Mode mixing and spaser quenching

While in the absence of gain, different plasmon modes are orthogonal, the presence of QEs with random positions and orientations violates the underlying NP symmetry and leads to mode mixing. For large number M of QEs uniformly distributed around the NP, the spherical symmetry is preserved *on average*, so that single-mode description is reasonably accurate, while corrections due to mode mixing are suppressed by factor of $1/M$. However, for QEs located close to NP surface, the coupling to nonresonant modes is strong, so that even weak inhomogeneity of QE distribution can lead to significant mode mixing effects. Below we analyze the effect of mode mixing on spaser condition and establish a simple criteria, in terms of system parameters, for the validity of single-mode description.

A. *Quenching onset*

We assume that QE frequency ω_{21} is tuned to the dipole plasmon mode ($l = 1$) frequency ω_1, and incorporate the effect of higher ($l > 1$) nonresonant modes as follows. First, we separate out the resonant and higher-order modes in the first equation of system (10) by splitting it into two equations,

$$\Omega\rho_1 - S_{11}\alpha_1\rho_1 - \sum_{\lambda} S_{1\lambda}\alpha_\lambda\rho_\lambda = 0,$$

$$\Omega\rho_\lambda - S_{\lambda 1}\alpha_1\rho_1 - \sum_{\lambda'} S_{\lambda\lambda'}\alpha_{\lambda'}\rho_{\lambda'} = 0, \tag{16}$$

where we denoted $\Omega = \omega - \omega_{21} + i/\tau_2$, and the indexes λ and λ' do *not* include the resonant mode. In the first order in $1/M$, we include the coupling of resonant mode with nonresonant modes, but disregard nonresonant modes' coupling with each other. After replacing the matrix $S_{\lambda\lambda'}$ in the second equation by its average (12) and eliminating ρ_λ from the first equation of system (16), we obtain the consistency condition [restoring indexes (lm)],

$$\Omega\delta_{mm'} - \left(S_{1m,1m'} + \sum_{l_1 m_1}' \frac{S_{1m,l_1m_1}\alpha_l S_{l_1m_1,1m'}}{\Omega - s_{l_1}\alpha_{l_1}} \right)\alpha_1 = 0, \tag{17}$$

where the sum runs over $l_1 > 1$ and m_1 in the interval $(-l_1, l_1)$, while m, m' take values $(-1, 0, 1)$. Performing angular and orientational averaging in Eq. (17), we obtain the spaser condition in the form

$$\omega - \omega_{21} + i/\tau_2 - s_1\alpha_1(\omega)\left[1 + f(\omega)\right] = 0, \tag{18}$$

where the function

$$f(\omega) = \frac{1}{5M}\sum_{l>1}\frac{(11l+7)s_l\alpha_l(\omega)}{\omega - \omega_{21} + i/\tau_2 - s_l\alpha_l(\omega)} \tag{19}$$

includes the coupling to high-l modes. In the absence of such coupling ($f = 0$), the solutions of Eq. (18) for spaser frequency ω_0 and threshold population N_0 are givenby Eq. (14).In the presence of coupling, the corresponding solutions ω and N deviate from ω_0 and N_0 by the amount depending on distance d to the NP surface. While for $d \gtrsim R$, the coefficients s_l, given by Eq. $s_l = \frac{\mu^2}{\hbar}\frac{(l+1)N}{3(R+d)^{2l+4}}$, change rapidly with d,

for $d \ll R$ they are only weakly dependent on d, indicating that, in this case, the main contribution to f comes comes from multitude of modes with large l. To estimate the characteristic distance d below which high-l modes become important, we note that, for nonresonant modes we have $\tau_2 s_l \alpha_l \ll 1$ and so the last term in denominator of Eq. (19) can be disregarded. Since the main contribution comes from high-l terms, so we can replace α_l by $R^{2l+1}[\varepsilon(\omega)-\varepsilon_d]/[\varepsilon(\omega)+\varepsilon_d]$ [see Eq. (6)]. For $d/R \ll 1$, we can replace the sum over l by the integral. For small deviations of ω from the plasmon frequency, i.e., $\varepsilon(\omega) \approx \varepsilon(\omega_1) = -2\varepsilon_d$, and using that $(\omega-\omega_{21})\tau_2 \ll 1$, we finally obtain

$$|f| \approx \frac{\mu^2\tau_2}{2\hbar d^3}\frac{N}{M}. \tag{20}$$

The onset of quenching corresponds to $|f| \sim 1$. In the first order, replacing N with $N_0 = R^3\varepsilon''(\omega_1)\hbar/2\mu^2\tau_2$ from Eq. (14), we arrive at the estimate for onset value of d:

$$d \sim R\left[\frac{\varepsilon''(\omega_1)}{4M}\right]^{1/3}. \tag{21}$$

For example, for $M \sim 10^3$ and with $\varepsilon''(\omega_1) \approx 2$ for spherical Au NP, the mode mixing is important for $d/R \lesssim 0.1$.

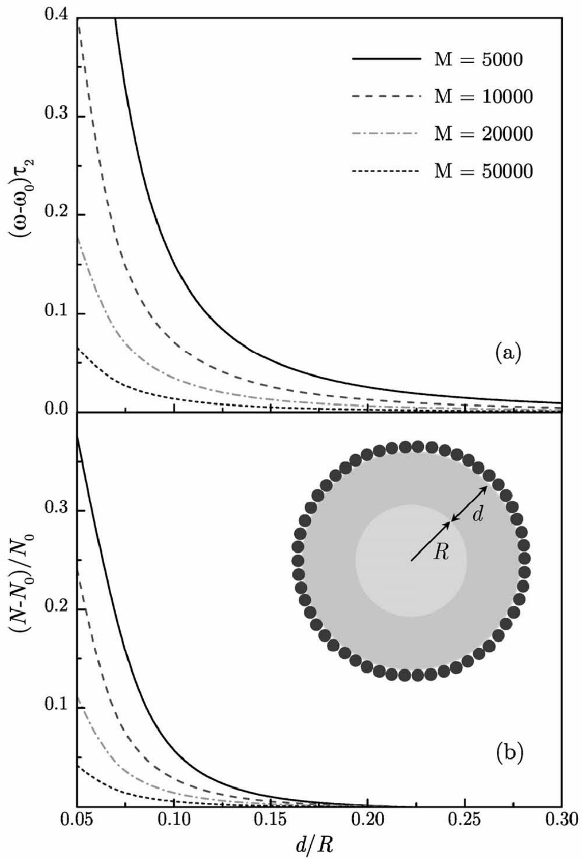


FIG. 2. (a) Spaserfrequency shift and (b) relative population inversion threshold shift are shown vs. shell thickness for several QE ensemble sizes. Inset: Schematics of QEs distributed on top of composite NP.

B. Numerical results

Below we present the results of numerical calculations for spherical Au NP of radius R and M QEs randomly distributed on top of dielectric shell at distance d from the metal surface with frequencies ω_{21} tuned to the dipole plasmon resonance frequency ω_1. In all calculations, we used experimental Au dielectric function [37] and included modes with angular momenta up to $l_{\max} = 50$. Note that we excluded the region of very small

distances dominated by quantum effects, which are out of scope of this paper [38].

In Fig. 2, we plot the spaser frequency ω and population inversion threshold N vs. gain-NP distance d (see inset) obtained by solving Eq. (18) for several ensemble sizes. To highlight the role of nonresonant modes, we showthe deviations of ω and N from the corresponding values ω_0 and N_0 for resonant mode coupling only (i.e., $f = 0$). For small distances $d/R \ll 1$, the effect of nonresonant modes can be substantial depending on the ensemble size, consistent with our estimate (21). With decreasing d, the spaser frequency ω shifts upwards (high-order modes have larger frequencies), and so does threshold N to compensate the energy leakage to nonresonant modes not participatingin the feedback. At the same time, with increasing ensemble size M, the deviations of spaser frequency and of threshold population inversion from their single-mode values are significantly reduced, indicating restoration of spherical symmetry as fluctuations of the QE distribution diminish.

Note that the overall effect of nonresonant modes on spaser action is significantly weaker than on single-QE fluorescence. The calculated quantum efficiency Q, shown in Fig. 1, falls below 20% at distances $d \sim R$, and it is even lower for smaller NPs, indicating that fluorescence is largely quenched at such distances. In contrast, spaser quenching become substantial only for (average) gain-NP separations well below NP size (see Fig. 2), while for larger distances, spaser quenching is largely suppressed.

Finally, we considered here a specific setup with all QEs distributed at about equal distance to the metal NP, e.g., on top of dielectric shell. Such configuration provides us with better control over gain coupling to nonresonant modes and allows straightforward comparison with the single QE radiation quenching near the metal surface. In a more common setup, gain is distributed within some region with volume comparable or exceeding the metal volume, e.g., within the dielectric shell, implying that

only a relatively small fraction of QEs, located sufficiently close to the surface, can undergo energy exchange with higher-order modes, whose electric fields decay rapidly outside the metal structure.Therefore, for a given gain concentration, extending the gain region size should lower the spaser threshold by suppressing quenching effects.

V. Conclusions

In summary, we studied the effect of energy transfer between gain and nonresonant plasmon modes on spaser action. We found that mode mixing, originating from inhomogeneity of gain distribution, interferes with the feedback mechanism and leads to the upward shift of spaser frequency and population inversion threshold. We have shown that these quenching effects are restricted to a thin layer near the metal surface, and are suppressed for large gain concentration. We established a simple criteria relating quenching onset with gain concentration supported by numerical calculations for core-shell NP based spasers.

This work was supported in part by the National Science Foundation under grants No. DMR-1610427 and No. HRD-1547754.

REFERENCES

1. *Bergman D. and Stockman M.I.*, Phys. Rev. Lett., **90**, 027402, (2003).
2. *Stockman M.I.,* Nature Photonics, **2**, 327, (2008).
3. *Stockman M. I.,* J. Opt. **12**, 024004, (2010).
4. *Noginov M.A., Zhu G., Belgrave A.M., Bakker R., Shalaev V.M., Narimanov E.E., S. Stout, E. Herz, T.* Suteewong and U. Wiesner, Nature, **460**, 1110, (2009).
5. *Oulton R.F., Sorger V.J, Zentgraf T., Ma R.-M., Gladden C., Dai L., Bartal G., and Zhang X.,* Nature **461**, 629, (2009).

6. *Plum E., Fedotov V.A., Kuo P., Tsai D.P. and Zheludev N.I.,* Opt. Expr. **17**, 8548, (2009).
7. *Ma R., Oulton R., Sorger V., Bartal G. and Zhang X.,* Nature Mater., **10**, 110, (2010).
8. *Ding K., Liu Z.C., Yin L.J., Hill M.T., Marell M.J.H., Veldhoven van P. J., Netzel R. and Ning C.Z.,* Phys. Rev. B **85**, 041301(R) (2012).
9. *Lu Y.-J., Kim J., Chen H.-Y., Wu C.i, Dabidian N., Sanders C.E., Wang C.-Y., Lu M.-Y., Li B.-H., Qiu X., Chang W.-H., Chen L.-J., Shvets G., Shih C.-K., and Gwo S.,* Science **337**, 450 (2012).
10. *Zhou, W. Dridi M., Suh J.Y., Kim C.H., Co D.T., Wasielewski M.R., Schatz G.C. and Odom T.W.,* Nat. Nano. **8**, 506 (2013).
11. *Meng X., Kildishev A.V., Fujita K., Tanaka K. and Shalaev V.M.*, Nano Lett. **13**, 4106, (2013).
12. *Lu Y., Wang C.-Y., Kim J., Chen H.-Y., Lu M.-Y., Chen Y.-C., Chang W.-H., Chen L.-J., Stockman M.I., C.-K. Shih*, Gwo S., Nano Lett. **14**, 4381 (2014).
13. *Ma R.-M., Ota S., Li Y., Yang S. and Zhang X.*, Nat. Nano. **9**, 600 (2014).
14. *Yang A., Hoang T.B., Dridi M., Deeb C., Mikkelsen M.H., Schatz G.C. and Odom T.W.,* Nat. Comm. **6**, 6939 (2015).
15. *Stockman M.I.,* in Plasmonics: Theory and Applications, edited by T. V. Shahbazyan and M. I. Stockman (Springer, New York, 2013).
16. *Apalkov V. and Stockman M.I.,* Light: Science & Applications **3**, e191 (2014).
17. *Rupasinghe C., Rukhlenko I. D. and Premaratne M.,* ACS Nano, **8** 2431 (2014).
18. *Pustovit V.N., Urbas A.M. and Zelmon D.E.,* Phys. Rev. B **94**, 235445 (2016).
19. *Premaratne M.and Stockman M. I.,* Adv. Opt. Phot. **9**, 79 (2017).
20. *Gersten J.and Nitzan A., Chem J.,* Phys. **75**, 1139 (1981).

21. Ruppin R., Chem J.. Phys. **76**, 1681 (1982).
22. Pustovit V.N. and Shahbazyan T.V., Phys. Rev. Lett., **102**, 077401, (2009).
23. Pustovit V.N. and Shahbazyan T.V., Phys. Rev. B, **82**, 075429, (2010).
24. *Dulkeith E., Morteani A.C., Niedereichholz T., Klar T.A., Feldmann J., Levi S.A., M. F.C.J. van Veggel, D.N., Reinhoudt M., Moller and Gittins D.I.,* Phys. Rev. Lett. **89**, 203002 (2002).
25. *Geddes C.D. and Lakowicz J.R., Fluoresc J.* **12**, 121 (2002).
26. Dulkeith *E., Ringler M., T.A. Klar, Feldmann J., Javier A.M. and Parak W.J.,* Nano Lett. **5**, 585 (2005).
27. *Mertens H., Biteen J.S., Atwater H.A. and Polman A.,* Nano Lett. **6**, 2622 (2006).
28. *Anger P., Bharadwaj P., and Novotny L.,* Phys. Rev. Lett. **96**, 113002 (2006).
29. *Kuhn S., Hakanson U., Rogobete L. and Sandoghdar V.,* Phys. Rev. Lett. **97**, 017402 (2006).
30. *Seelig J., Leslie K., Renn A., K1uhn S., Jacobsen V., Corput M. van de, Wyman C. and Sandoghdar V.,* Nano Lett. **7**, 685 (2007).
31. *Wegener M., Garcia-Pomar J. L., Soukoulis C.M., Meinzer N., Ruther M. and Linden S.,* Opt. Express **16**, 19785 (2008).
32. *Arnold N., Ding B., Hrelescu C. and. Klar T.A*, Beilstein J. Nanotechnol. **4**, 974 (2013).
33. *Zhong X.-L and Li Z.-Y.,* Phys. Rev. B **88**, 085101 (2013).
34. *Baranov D.G., Andrianov E.S., Vinogradov A. P. and Lisyansky A.*A., Opt. Express **21**, 10779 (2013).
35. *BordoPhys V.G.,* Rev. A **88**, 013803 (2013).
36. *Pustovit V.N., Urbas A.M., Chipouline A.V. and Shahbazyan T.V.,* Phys. Rev. B **93**, 165432 (2016).
37. *Johnson P.B. and Christy R.W.,* Phys. Rev. B, **6**, 4370, (1973).
38. *Pustovit V.N. and Shahbazyan T.V.,* J. Chem. Phys. **136**, 204701 (2012).

ONE-DIMENSIONAL FRÖHLICH POLARON WITH SPIN-ORBIT COUPLING

K. Vardanyan, A. Kirakosyan, A. Vartanian[1]

Department of Solid State Physics, Yerevan State University, 1, Al. Manoogian, 0025 Yerevan, Armenia

Abstract. We utilize the Lee-Low-Pines variational method to clarify the effects of the spin-orbit couplings on the properties of the quasi-one-dimensional Fröhlich polaron in the weak and intermediate coupling limits of the electron-phonon interaction. Polaron energy and polaron shift are investigated numerically and analytic expessions for the polaron self-energy and effective mass are obtained as functions of the spin-orbit coupling parameters. We have shown that the basic parameters of the polaron in nanowire can be effectively manipulated by the Rashba and Dresselhaus spin-orbit couplings, and thus they can be used for controlling the various physical processes in nanowires.

Keywords: nanowire, polaron, spin-orbit coupling, CdSe

I. INTRODUCTION

One of the central issues in the spintronics is how to effectively control the spin degree of freedom of carriers. To this aim, the Rashba and Dresselhaus mechanisms of spin-orbit (SO) coupling of confined electrons are relevant in low-dimensional systems with zinc-blende structure. Depending on the material characteristics, either of these couplings, or both of them together, can play a leading role in spin-based solid state nanoscale devices, since the intensity of these mechanisms can be controlled by an external electric field and by specific material engineering methods [1-3]. Over the past years, a lot of studies have focused on the role of SO coupling in the context of electron-polar optical phonon interaction. Particularly, it has been shown that the spin-orbit coupling leads to quite different polaronic effect in semiconductor nanostructures. It has been shown that in a weak electron-phonon coupling regime polaronic binding energy is enhanced by the spin-orbit coupling and the polaronic effective mass varies differently in different spin bands [4, 5]. The main objective of this paper is an

[1]Corresponding author. E-mails: vardan@ysu.am (A. Vartanian), kirakosyan@ysu.am (A. Kirakosyan), karvard (K. Vardanyan)

analytical investigation of the interplay between Rashba and Dresselhaus spin-orbit and electron-phonon interactions in weak and intermediate coupling approximations.

We consider a one-dimensional electron system interacting with confined and interface polar-optical phonon modes [6] in the zinc-blende semiconductor nanostructure and adopt a Lee-Low-Pines approach modified in view of the cylindrical symmetry.

Although spin-dependent electron phenomena in nanowire has been studied extensively in recent years, to the best of our knowledge, the influence of SO coupling on the Fröhlich polaron properties in nanowires has not already been studied. The main objective of this paper is an analytical investigation of the interplay between Rashba and Dresselhaus SO and electron-phonon interactions in weak and intermediate coupling approximations and clarifies the possibility to control and manipulate polaron states via gate voltages.

II. THEORETICAL FRAMEWORK AND DISCUSSION

We consider a polar semiconductor parabolic nanowire with a circular cross section of radius R, embedded into nonpolar medium, and a uniform electric field applied perpendicularly to the nanowire axis. In addition, one can also consider that electrons occupy only the lowest wire subband. The system Hamiltonian H in the presence of both the Dresselhaus and the Rashba SO coupling terms is then of the form

$$H = \left[\frac{\hbar^2}{2m^*}\left(\hat{k}_x^2 + \hat{k}_y^2 + \hat{k}_z^2\right) + V_0(y,z) + |e|Fy\right] I + H_R + H_D + \sum_{\sigma}\left(H_\sigma + H_{el-ph}^{\sigma}\right), \qquad (1)$$

where m^* is the electron effective mass, $V_0(y,z)$ is the confining potential energy of an electron in the nanowire, F is the intensity of the electric field, e is the electron charge, I is the unit matrix, $\hat{k}_v = -i\,\partial/\partial v,\ v = x, y, z$, H_R and H_D are the spin-orbit coupling Rashba and Dresselhaus terms in nanowire, respectively, $\sigma = \mathrm{LO}$ and $\sigma = \mathrm{IO}$ denote the bulk-type and the interface-type optical

phonon modes with one-dimensional wave number q, respectively, H_σ is the phonon Hamiltonian and H^{σ}_{el-ph} is the electron-phonon interaction Hamiltonian [6].

The SO coupling that arises from structure asymmetry in a nanowire and often referred to as the Rashba term [7], can be written as $H_R = \alpha \hat{k}_x \sigma_z$, where $\alpha = (\hbar^2/(2m_0c)^2)(\langle \partial V_0(y,z)/\partial y \rangle + |e|F)$, $V_0(y,z) = m^*\Omega^2(y^2+z^2)/2$, Ω is the confining potential frequency. Here, $\langle \partial V_0(y,z)/\partial y \rangle \neq 0$ since the inversion symmetry is lacking in the y direction due to electric field applying along y direction. In order to obtain the Dresselhaus Hamiltonian in one-dimensional systems which associated with bulk inversion asymmetry in semiconductors, we should be integrate the bulk spin-orbit Hamiltonian [8] over the y and z directions. The effective Dresselhaus Hamiltonian then reduces to $H_D = \beta \hat{k}_x \sigma_x$ [9], where β the Dresselhaus parameter.

In the following, we consider the weak or intermediate electron-phonon coupling limit for the polaron with the Hamiltonian (1) and adopt the Lee-Low-Pines method [10] as usual to study the polaron problem in a nanowire. The total energy of the system is found to be

$$E_{k\mu} = E^0_{k\mu} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}(\eta^2_{LO} + \eta^2_{IO}) - \sum_{sq\sigma} \frac{|\Gamma^\sigma_s(q)|^2 |P^\sigma_{sq}|^2}{\hbar\omega_\sigma - \frac{\hbar^2 kq}{m^*} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m^*} - \mu\sqrt{\alpha^2+\beta^2}\,q + \frac{\hbar^2 qk}{m^*}\eta_\sigma}. \quad (2)$$

where

$$E^0_{k\mu} = \hbar\Omega - \frac{e^2F^2}{2m^*\Omega^2} + \frac{\hbar^2k^2}{2m^*} + \mu\sqrt{\alpha^2+\beta^2}\,k, \quad (3)$$

$$P^\sigma_{sq} = \langle \psi_{k\mu}(x,\rho,\varphi) | G^\sigma_{sq}(\rho) e^{im\varphi} | \psi_{k\mu}(x,\rho,\varphi) \rangle, \quad (4)$$

$$\psi_{k\mu}(x,\rho,\varphi) = \frac{(m^*\Omega)^{1/2} e^{ikx}}{(\pi\hbar)^{1/2}\sqrt{2L(1-\mu sin\theta)}} \begin{pmatrix} cos\theta \\ \mu - sin\theta \end{pmatrix} e^{-\frac{m^*\Omega}{2\hbar}\left[\rho^2 + 2\rho\frac{eF}{m^*\Omega^2}cos\varphi + \left(\frac{eF}{m^*\Omega^2}\right)^2\right]}, \quad (5)$$

$$G^{LO}_{mlq}(\rho) = J_m\left(\alpha_{ml}\frac{\rho}{R}\right), \qquad G^{IO}_{mq}(\rho) = \begin{cases} K_m(qR) I_m(q\rho), & \rho \le R, \\ I_m(qR) K_m(q\rho), & \rho > R, \end{cases} \quad (6)$$

k is the module of the one-dimensional electron wave number, $\mu = \pm 1$ is the chirality quantum number, L is the normalization length, the angle parameter θ is defined as $tg\theta = \alpha/\beta$ and describes the relative strength of the Rashba and Dresselhaus SO couplings, $J_m(x)$ is the Bessel

function of the mth order, α_{ml} is the lth zero of $J_m(x)$, $K_m(x)$ and $I_m(x)$ are the first and second kind modified Bessel functions, respectively, $\Gamma_s^{\sigma}(q)$ describes the strength of the electron-phonon interaction [6].

When $\hbar^2k^2/2m^*$ is sufficiently small in comparison with phonon energy $\hbar\omega_\sigma$ so that no spontaneous emission of phonons can occur, Eq. (24) can be solved self-consistently for a given value of the electron energy. As a result we obtain the following equation for η_σ:

$$\frac{\eta_\sigma}{1-\eta_\sigma} = \sum_{sq} \frac{2\frac{\hbar^2q^2}{m^*}\left|\Gamma_{sq}^{\sigma}\right|^2\left|P_{sq}^{\sigma}\right|^2}{\left(\hbar\omega_\sigma + \frac{\hbar^2q^2}{2m^*} - \mu\sqrt{\alpha^2+\beta^2}q\right)^3}, \tag{7}$$

The polaron self-energy, E_{pol}^{self}, and the effective mass, m_{pol}, for the motion parallel to the wire axis, are defined by expanding the right hand side of equation (2) to terms quadratic in k:

$$E_{pol}^{self} = \sum_{sq\sigma} \frac{\left|\Gamma_{sq}^{\sigma}\right|^2\left|P_{sq}^{\sigma}\right|^2}{\hbar\omega_\sigma + \frac{\hbar^2q^2}{2m^*} - \mu\sqrt{\alpha^2+\beta^2}q}, \qquad m_{pol} = \frac{m^*}{1-\eta_{LO}-\eta_{IO}}. \tag{8}$$

The obtained analytical expressions allow us to calculate the energy as well as the basic parameters of Fröhlich polaron (polaron self-energy and polaron effective mass).

III. NUMERICAL RESULTS AND DISCUSSION

We perform numerical calculations of the polaron self-energy and effective mass of the polaron in CdSe nanowires. The electron ground-state properties are determined by the electron self-energy due to electron-phonon interaction as well as SO coupling. In Fig.3 the self-energy and the effective mass of polaron are shown as a function of the Rashba SO coupling parameter for "$+$"-spin state and "$-$"-spin state. The polaron self-energy and effective mass have in common with the increase of Rashba SO coupling parameter: both polaron basic parameters increase for the "$+$"-spin state and decrease for the "$-$"-spin state. It is a surprising finding the substantially different in magnitude contributions of IO- and bulk-type LO-phonon modes in these characteristics. In the same

conditions ($F = 1\text{kV/cm}$, $R = 8.3\text{nm}$), the contribution of the IO phonon modes to the polaron self-energy is dominant, but this we cannot assert with respect to the polaron effective mass. In this figure the contributions from electron-IO phonon (dashed curves) and electron-bulk-type LO phonon (dotted curves) interactions as well as their total contribution (IO+LO) (solid curves) in basic parameters of the polaron as a function of the Rashba parameter α at $\beta = 0$ are represented separately. We also represented the results of the total contribution obtained at $\beta = 2.7 \cdot 10^{-9}$ eVcm (dashed-dotted curves). When considering the interaction of an electron with the phonon modes of IO, bulk-type LO, as well as IO+LO, the polaron mass (polaron self-energy) for the " − "-spin state increases by 5.9, 20.3, 32.8 (17.6, 20.5, 18.3) percent, respectively, when $\beta = 0$ and α increase from

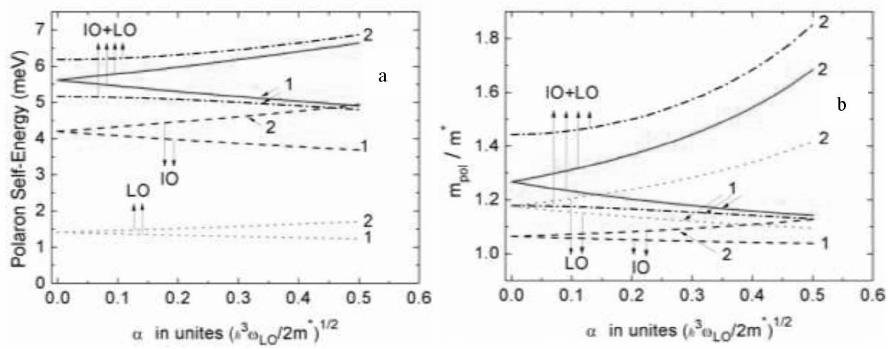


Fig.3. Polaron self-energy (a) and polaron effective mass (b) as functions of the Rashba parameter α at $\beta = 0$ and at $R = 8.3$ nm. Curves (1) and (2) represent polaron states with $\mu = 1$ and $\mu = -1$, respectively. Dashed-dotted curves show IO+LO results at $\beta = 2.7 \cdot 10^{-9}$ eVcm.

0 up to $4.5 \cdot 10^{-9}$ eVcm. In the same conditions, but $\beta = 2.7 \cdot 10^{-9}$ eVcm, the growth of the polaron mass (polaron self-energy) is 28.3 (11.1) percent, when both electron-IO phonon and electron-bulk-type LO phonon interactions are taken into account jointly. For the " + "-spin state, the decrease of the polaron mass (polaron self-energy), for $\beta = 0$ and $0 \leq \alpha \leq 4.5 \cdot 10^{-9}$, is 2.8, 6.9,

and 10 (12.3,13.6 and 12.6) percent, respectively, when considering the electron interactions with the IO- and bulk-type LO-phonon modes separately and jointly.

These estimates show that the interplay between SO coupling and electron-phonon interaction in nanowire allows different tailoring of the polaron properties of the two spin-polarized bands. Consequently, it is possible to consider these tuned interactions as effective means for controlling various physical phenomena in nanowires. Therefore, the obtained results can also be relevant to the experiments in nanowires.

ACKNOWLEDGMENTS

This work has been supported by State Committee of Science of the Ministry of Education and Science of Armenia (SCS MES RA), within the frame of the research Project No. 15T-1C363.

References

1. S. Datta, B. Das, *Appl. Phys. Lett.* **56**, 665 (1990).
2. T. Koga, J. Nitta, H. Takayanagi, S. Datta, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 126601 (2002).
3. I. Žutić, J. Fabian, S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
4. Z. Li, Z. Ma, A.R. Wright, C. Zhang, *Appl. Phys. Lett.* **90**, 112103 (2007).
5. K.A. Vardanyan, A.L. Vartanian, A.A. Kirakosyan, *Eur. Phys. J.* B **85,** 367 (2012).
6. H-J Xie, Ch-Yu Chen, B-K Ma, *Phys. Rev.* B **61** 4827 (2000).
7. E.I. Rashba, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
8. G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
9. H.C. Lee, S.-R. E. Yang *Phys. Rev.* B **72**, 245338 (2005).
10. T. D. Lee, F. E. Low, D. Pines, *Phys. Rev.* **90**, 297 (1953).

АЛМАЗ С NV-ЦЕНТРАМИ: ПЕРСПЕКТИВНЫЙ МАТЕРИАЛ ДЛЯ СЕНСОРНЫХ И КВАНТОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ

А.В. Папоян[1,2]

[1] Институт физических исследований НАН Армении
[2] Российско-Армянский университет
papoyan@ipr.sci.am

АННОТАЦИЯ

Азотно-вакансионный (NV) центр в алмазе представляет собой искусственный атом с уникальными характеристиками, обуславливающими перспективность его использования в научных разработках и высоких технологиях. В статье приводится краткий обзор работ по свойствам NV-центра в алмазе и его применениям в качестве сенсора магнитных и электрических полей, температуры, а также в схемах квантовых информационных технологий. Представлены также перспективы развития технологий на основе этого материала в Армении.

Ключевые слова: NV-центр в алмазе, искусственный атом, оптическая магнитометрия, сенсоры полей, квантовые информационные технологии.

1. Введение

Многочисленные исследования, проведенные в последние десятилетия, показали, что атомные системы, обладающие дискретной системой энергетических уровней с эффективными переходами в ви-

димой и ближней ИК областях спектра, в частности, пары щелочных металлов, могут быть использованы для измерения магнитных и электрических полей, а также для создания элементов и схем в квантовых информационных технологиях. Однако их практическое применение имеет ряд ограничений, связанных со сложностью работы с газообразной средой, малой плотностью рабочих атомов, наличием релаксационных процессов, ограничивающих времена когерентности, а также большими размерами газовых ячеек. В связи с этим исследователи все чаще обращаются к твердотельным схемам, в частности, редкоземельным ионам в матрице диэлектрических кристаллов, с использованием которых достигнуты обнадеживающие результаты. Особое место в этом ряду занимают NV-центры (nitrogen-vacancy centers) в алмазе – дефекты кристалла, представляющие собой искусственные атомы, возникающие при удалении атома углерода из узла решётки алмаза и связывании образовавшейся вакансии с примесным атомом азота.

Хотя алмазы и различного рода дефекты в них исследовались давно, широкий интерес к NV-центрам возник лишь в 1997 г., когда были созданы кристаллы с настолько низкой концентрацией примесей, что расстояние между соседними NV-центрами составляло несколько микрон, исключая взаимодействие между ними, так что отдельный центр можно рассматривать как изолированный атом [1]. Энергетическая структура и система переходов NV-центра, допускающая когерентное управление населенностью основного уровня посредством электромагнитного излучения, оказались исключительно благоприятными для целого ряда научных и прикладных задач. В ряде ведущих центров начались исследования, в которых NV-центры в алмазе использовались в разработке новых схем в области квантовых информационных технологий [2–4], оптической магнитометрии [5–7], сенсорных технологиях [8–10], микроскопии и томографии [1,5,6], а также в ряде фундаментальных исследований.

В настоящей работе описаны получение и основные характеристики этого перспективного материала, приводится краткий обзор наиболее значимых работ, а также представлены разработки, планируемые для реализации в Армении.

2. Получение и основные свойства

Алмаз представляет собой одно из аллотропных состояний углерода и является кристаллом с ковалентной химической связью, кубической сингонией и гранецентрированной кубической решеткой в пространственной группе Fd3m с двумя тетраэдрически связанными атомами в каждой элементарной ячейке. Природные алмазы, а также кристаллы, выращенные искусственно методом высокого давления и температуры (HPHT), могут содержать десятки примесей, в числе которых – примеси азота, входящие в алмаз в виде нескольких типов дефектных центров. Азотные (^{14}N) дефекты типа C или P1 являются основой для создания NV-центров. Подобранные образцы с необходимой концентрацией таких дефектов подвергают электронному облучению (энергия – 0.1–10 МэВ, доза – 10^{18}–10^{20} см$^{-2}$), создающими в кристалле вакансии углерода. При последующем отжиге в течение 1–3 часов при температуре 700–900°C вакансии мигрируют по кристаллу, захватываясь примесью азота, тем самым создавая NV-центр. Образовавшиеся центры могут быть нейтральными (NV^0) или отрицательно заряженными (NV^-), причем интерес представляет NV^- центр, энергетическая структура которого благоприятна для практических применений.

Схематическое представление энергетической структуры NV$^-$ центра в алмазе приведено на Рис.1. Строго говоря, этот центр является искусственной молекулой (см. верхнюю правую вставку). Первое возбужденное триплетное электронное состояние смещено по межъядерному расстоянию относительно основного с нулевой фононной линией на

637 нм, что обуславливает красный сдвиг спектра флуоресценции (~ 640–800 нм) относительно спектра поглощения (~ 510–610 нм). Для большинства приложений система уровней может быть представлена в виде атомной (левая схема на Рис.1). Основное триплетное состояние $^3A_2$ расщеплено на спиновые подуровни $m_s = 0$, $m_s = \pm 1$ с расщеплением D = 2.87 ГГц, причем последние вырождены в отсутствие магнитного поля *B*. С основного уровня имеют место сильные переходы на первое возбужденное электронное триплетное состояние ^3E со временем жизни ~ 10 нс, из которого центр флуоресцирует обратно на основное состояние, а также может перейти триплет-синглетной конверсией на уровень ^1E синглетного состояния с последующим переходом на метастабильный уровень $^1A_1$ (длина волны – λ = 1042 нм).

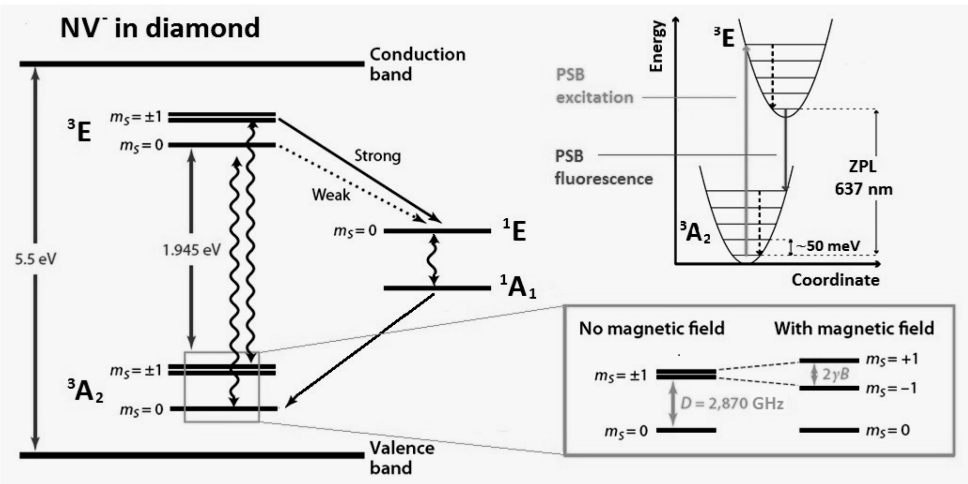


Рис. 1. Схематическое представление основных энергетических уровней и переходов NV⁻ центра в алмазе [9].

В основе большинства применений NV-центров в алмазах лежит спиновая когерентность основного парамагнитного состояния $^3A_2$ (S = 1) и возможность управления спиновой поляризацией с большим вре-

менем когерентности. Манипулирование спиновым состоянием реализуется посредством микроволнового излучения с частотой 2.87 ГГц, при этом детектирование спиновых состояний осуществляется оптически, посредством лазерного возбуждения (как правило, удобным источником с длиной волны λ = 532 нм), и регистрации интенсивности сигнала флуоресценции в диапазоне 650–800 нм или синглетного перехода на длине волны 1042 нм. Немаловажно отметить возможность проведения вышеуказанных исследований с использованием *единичного* NV-центра, что очень важно для разработки различных сенсоров с высоким пространственным разрешением, реализации схем магнитной микроскопии, создании устройств информационных и сенсорных технологий на основе структурированного распределения примеси.

Общий обзор по NV-центрам в алмазах представлен в работах [11,12]; отдельные работы посвящены динамике их формирования [13], электронной структуре [14,15] и свойствам [16], спектроскопии [17]. Следует также отметить, что при использовании единичных NV-центров в нанообразцах алмаза возникают особенности, связанные с поверхностными и размерными эффектами, которые имеют важное прикладное значение [18].

3. NV-центры в алмазах в квантовых информационных технологиях

Использование NV-центров в квантовых информационных технологиях основано на управлении долгоживущими спиновыми состояниями основного уровня $^3A_2$ посредством электромагнитного излучения. Время когерентности ограничено дефазировкой и релаксацией, обусловленной в основном взаимодействием NV-центра с соседними дефектами, в первую очередь – неспаренными атомами азота. В сильных внешних полях это взаимодействие может быть подавлено, и вре-

мя когерентности может быть существенно увеличено: так, в работе [19] удалось увеличить время спиновой когерентности до T_2 = 0.6 с при температуре 77 К.

Исследования в области квантовой информации проводятся по разным направлениям, включая разработку квантовых компьютеров, квантовую коммуникацию, криптографию и телепортацию. Круг задач охватывает стабильную генерацию однофотонных импульсов, квантовое распределение ключей, двухкубитные операции, коррекцию квантовых ошибок и т.д. Многочисленные работы подтверждают, что квантовое управление на основе NV-центров в алмазе может успешно использоваться для сбора, передачи и обработки квантовой информации.

В основе квантовой информации лежат квантовые биты-«кубиты», и создание физических систем для реализации кубитов является критической задачей в разработке квантовых компьютеров. В работе [2] проанализированы критерии, которым должны удовлетворять дефектные системы в твердых телах для создания, манипуляции и достоверной регистрации кубитов и показано, что в ряду возможных систем NV-центр в алмазе занимает особенное место благодаря высокой устойчивости и возможности работы при комнатной температуре.

Важным физическим процессом для квантовых информационных технологий является квантовая «запутанность» (entanglement), квантовомеханическое явление, при котором квантовые состояния двух или большего числа объектов оказываются взаимозависимыми и коррелированными, даже если эти объекты разнесены в пространстве за пределы любых известных взаимодействий. Это интригующее явление, находящееся в логическом противоречии с принципом локальности, не объясняемое в рамках классической физики. Запутанные кубиты в информационных технологиях могут быть использованы для создания логических вентилей, репитеров и квантовых сетей, они также лежат в основе квантовой криптографии и телепортации. В

работе [3] продемонстрирована «объявленная» (heralded) квантовая запутанность двух электронных спиновых кубитов на основе NV-центров в кристаллах алмаза, разнесенных друг от друга на расстояние 3 метра. Этот результат можно считать первым шагом к созданию удаленных квантовых сетей на базе твердотельных квантовых регистров.

Использование квантовых вентилей, основанных на сдвиге геометрической фазы, в квантовых вычислениях позволяет существенно повысить устойчивость к ошибкам и сбоям, обусловленными шумами и несовершенствами используемой системы. В работе [4] спиновые кубиты на одиночных NV-центрах в алмазе были использованы для реализации быстрых голономических однокубитных вентилей, работающих при комнатной температуре. Достигнут высокий уровень достоверности, необходимый для задействования квантовых протоколов исправления ошибок. Учитывая то, что алмазы с одиночными NV-центрами легко интегрировать в цепи квантовых вычислительных систем, а также высокую скорость квантовых вентилей и возможность работы без охлаждения, можно говорить о перспективности NV-центров в квантовых вычислительных технологиях.

4. Магнитометрия и сенсорные технологии с NV-центрами в алмазах

Магнитометрия на NV-центрах в алмазе основана на расщеплении вырожденных при $B = 0$ электронных спиновых подуровней $m_s = \pm 1$ основного состояния $^3A_2$ во внешнем магнитном поле (сдвиг – 2.8 МГц/Гс, см. Рис.1). В базовой схеме NV-центр возбуждается непрерывным излучением лазера с $\lambda = 532$ нм и регистрируется флуоресценция в красной области спектра на переходе ^3E – $^3A_2$. Одновременно посредством Ω-петли на кристалл подается микроволновое излучение, перестраиваемое по частоте в области D = 2.87 ГГц. При совпадении

частоты микроволнового излучения со смещенными в магнитном поле переходами $m_s = 0 \rightarrow m_s = \pm 1$ часть населенности основного уровня $m_s = 0$ уводится на уровни $m_s = \pm 1$, и в спектре оптической флуоресценции образуется провал, по частотному положению которого и определяется напряженность магнитного поля. Эта методика известна как «оптически детектируемый магнитный резонанс» (ODMR). В оптической схеме магнитометра часто используют технику сканирующей конфокальной микроскопии с применением дихроичного зеркала для разделения пучков лазерного возбуждения и флуоресценции NV-центра [1].

Чувствительность магнитометра на NV-центрах можно существенно увеличить, используя импульсные схемы возбуждения с использованием техники так называемых $\pi/2$- или π-импульсов в последовательности импульсов Рамсея или конфигурации спинового эхо Хана. При этом возбуждающий импульс поляризует спин, который далее испытывает свободную прецессию в магнитном поле в течение времени когерентности, после чего «считывающий» импульс проектирует угол поворота, возвращая спин в исходное состояние. Такой методикой достигается чувствительность порядка 1 нТл$\times$Гц$^{-1/2}$. Заметим, что при использовании микро- или нано-размерного кристалла с одиночным NV-центром [5] достигается пространственное разрешение, достаточное для картографирования магнитных микроструктур (например, жесткого диска компьютера). Обзор магнитометрии на основе NV-центров в алмазе и применениям приводится в работах [6, 9].

Благодаря высокой чувствительности энергии спиновых состояний к внешним воздействиям NV-центры в алмазе используются также в качестве сенсоров электрического поля и температуры. В работе [8] сообщается о достижении чувствительности 200 В$\times$см$^{-1}\times$Гц$^{-1/2}$, что в сочетании с наноразмером сенсора позволяет детектировать единичный элементарный заряд на расстоянии 150 нм. Важно отметить, что

такой сенсор может быть использован также в режиме сенсора магнитного поля. Высокая чувствительность к внешним полям и исключительно высокое пространственное разрешение, обеспечиваемое единичным NV-центром, обусловили его применение в качестве наносенсора в биологии [9], позволив также реализовать схемы контрастной микроскопии. Используя линейку NV-центров на основе имплантированных атомов азота и применяя метод TCPMG, в работе [10] был реализован температурный сенсор с чувствительностью 10 мК×Гц$^{-1/2}$, который позволяет исследовать сильно-градиентные тепловые процессы в наноразмерных системах и микроэлектронике.

5. Схема безмикроволнового магнетометра: перспективы

Прикладной потенциал схем на основе NV-центров в алмазе ограничен необходимостью использования, наряду с оптическим возбуждением, также плавно-перестраиваемого микроволнового излучения в области 2,87 ГГц. Кроме существенного упрощения схем сенсоров, разработка безмикроволновых схем позволила бы расширить области применения магнитометрии, в частности, для задач, в которых сенсор должен быть расположен близко к проводящим материалам (магнитная индукционная томография, картографирование магнитного поля и т. д.). Работы, проводимые в этом направлении в последние годы, уже принесли ощутимые результаты. Так, в [7] разработана концепция безмикроволновой магнитометрии на основе NV-центров в алмазе, в которой управление спиновым состоянием триплета основного состояния осуществляется посредством антипересечения уровней при приложении постоянного смещающего магнитного поля в 102.4 мТ. Достигнута чувствительность на уровне 6 нТл×Гц$^{-1/2}$, достаточная для применений в магнитной микроскопии.

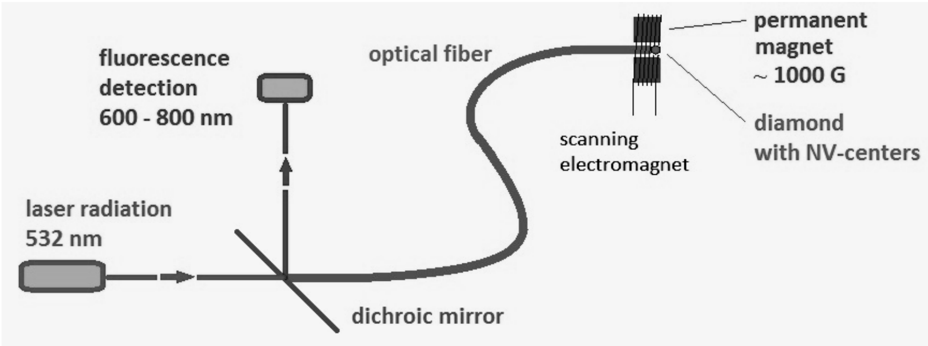


Рис. 2. Проект схемы безмикроволнового магнитометра на основе микрокристалла алмаза с NV-центром.

В настоящее время обсуждается возможность совместных работ учеными из Университета Майнца (Германия) и ИФИ НАН РА по разработке практической схемы магнитометра, в котором микрокристалл алмаза с NV-центрами будет установлен на конце волоконного световода, посредством которого будет осуществляться ввод возбуждающего излучения и вывод излучения флуоресценции, а кристалл будет установлен в компактной магнитной головке, состоящей из постоянного магнита и сканирующего электромагнита (Рис.2). Планируется также освоение технологии изготовления и тестирования образцов алмазов с NV-центрами в Армении.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Gruber A., Drabenstedt A., Tietz C., Fleury L., Wrachtrup J., von Borczyskowski C.* Science 276 (1997) 2012–2014.
2. *Weber J.R., Koehl W.F., Varley J.B., Janotti A., Buckley B.B., Van de Walle C.G., Awschalom D.D.* PNAS 107 (2010) 8513–8518.

3. *Bernien H., Hensen B., Pfaff W., Koolstra G., Blok M.S., Robledo L., Taminiau T.H., Markham M., Twitchen D.J., Childress L., Hanson R*. Nature 497 (2013) 86–90.
4. *Arroyo-Camejo S., Lazariev A., Hell S.W., Balasubramanian G*. Nature Commun. 5 (2014) 4870.
5. *Hong S., Grinolds M.S., Pham L.M., Le Sage D., Luan L., Walsworth R.L., Yacoby A*. MRS Bulletin 38 (2013) 155–161.
6. *Rondin L., Tetienne J.P., Hingant T., Roch J.F., Maletinsky P., Jacques V*. Rep. Prog. Phys. 77 (2014) 056503.
7. *Wickenbrock A., Zheng H., Bougas L., Leefer N., Afach S., Jarmola A., Acosta V.M., Budker D*. Appl. Phys. Lett. 109 (2016) 053505.
8. *Dolde F., Fedder H., Doherty M.W., Nöbauer T., Rempp F., Balasubramanian G., Wolf T., Reinhard F., Hollenberg L.C.L., Jelezko F., Wrachtrup J*. Nature Phys. 7 (2011) 459–463.
9. *Schirhagl R., Chang K., Loretz M., Degen Ch.L*. Annu. Rev. Phys. Chem. 65 (2014) 83–105.
10. *Wang J., Feng F., Zhang J., Chen J., Zheng Zh., Guo L., Zhang W., Song X., Guo G., Fan L., Zou Ch., Lou L., Zhu W., Wang G*. Phys. Rev. B 91 (2015) 155404.
11. *Jelezko F., Wrachtrup J*. Phys. Stat. Solid. A 203 (2006) 3207–3225.
12. *Doherty M.W., Manson N.B., Delaney P., Jelezko F., Wrachtrupe J., Hollenberg L.C.L*. Phys. Rep. 528 (2013) 1–45.
13. *Deák P., Aradi B., Kaviani M., Frauenheim Th., Gali A*. Phys. Rev. B 89 (2014) 075203.
14. *Lenef A., Rand S.C*. Phys. Rev. B 53 (1996) 13441–13455.
15. *Lenef A., Brown S.W., Redman D.A., Rand S.C*. Phys. Rev. B 53 (1996) 13427–13440.
16. *Maze J.R., Gali A., Togan E., Chu Y., Trifonov A., Kaxiras E., Lukin M.D*. New J. Phys. 13 (2011) 025025.
17. *Jelezko F., Tietz C., Gruber A., Popa I., Nizovtsev A., Kilin S., Wrachtrup J*. Single Mol. 2 (2001) 255–260.
18. *Hu W., Li Zh., Yang J*. Comput. Theor. Chem. 1021 (2013) 49–53.
19. *Bar-Gill N., Pham L.M., Jarmola A., Budker D., Walsworth R.L*. Nature Commun. 4 (2013) 1743.

DIAMOND WITH NV-CENTERS: A PROMISING MATERIAL FOR SENSING AND QUANTUM TECHNOLOGIES

A. Papoyan[1,2]

[1] Institute for Physical Research, NAS of Armenia
[2] Russian-Armenian University
papoyan@ipr.sci.am

ABSTRACT

Nitrogen-vacancy (NV) center in diamond behaves as an artificial atom with unique characteristics, which allow its perspective usage in a large variety of scientific developments and high technologies. In this article, we present a concise review on works devoted to properties of NV-center in diamond, and on its applications for sensing of magnetic and electric fields, temperature, as well as in quantum information technology schemes. Perspectives of technological developments in Armenia based on this material are also addressed.

Keywords: NV center in diamond; artificial atom; optical magnetometry; field sensors; quantum information technologies.

NV-ԿԵՆՏՐՈՆՆԵՐՈՎ ԱԼՄԱՍ. ՀԵՌԱՆԿԱՐԱՅԻՆ ՆՅՈՒԹ ՍԵՆՍՈ-ՐԱՅԻՆ ԵՎ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՏԵԽՆՈԼՈԳԻԱՆԵՐԻ ՀԱՄԱՐ

Ա.Վ. Պապոյան[1,2]

[1] ՀՀ ԳԱԱ Ֆիզիկական հետազոտությունների ինստիտուտ
[2] Հայ-Ռուսական համալսարան
papoyan@ipr.sci.am

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Ալմաստում ազոտա-վականսիոն (NV)-կենտրոնը արհեստական ատոմ է, որի յուրօրինակ բնութագրերը պայմանավորում են այդ նյութի օգտագործման հեռանկարայնությունը գիտական մշակումներում և

բարձր տեխնոլոգիաներում: Հոդվածում բերվում է հակիրճ ակնարկ՝ նվիրված ալմաստում NV-կենտրոնի հատկություններին և դրա կիրառություններին՝ որպես մագնիսական ու էլեկտրական դաշտերի և ջերմաստիճանի զգայակ, ինչպես նաև քվանտային տեղեկատվական տեխնոլոգիաների սխեմաներում: Ներկայացված են նաև Հայաստանում այդ նյութի հիման վրա տեխնոլոգիաների զարգացման հեռանկարները:

Հիմնաբառեր՝ Ալմաստում NV-կենտրոն, արհեստական ատոմ, օպտիկական մագնիսաչափություն, դաշտերի զգայակներ, քվանտային տեղեկատվական տեխնոլոգիաներ:

Вестник РАУ № 1, 2017, 60-67

WHISPERING-GALLERY MICRORESONATOR WITH A NEW EASY AND CONTROLLABLE EXCITATION METHOD

H. Parsamyan, H. Haroyan, Kh. Nerkararyan

Yerevan State University

ABSTRACT

We consider a simple structure of micro resonator with easy and controllable coupling with external excitation wave. The resonator is formed on the basis of the dielectric / metal / dielectric structure, where the wave energy is stored in a semicylindrical dielectric with a high permeability. Proposed microresonator combines the properties of a Fabry-Perot resonator, where the input of wave energy is carried through mirrors and a cylindrical resonator, where whispering-gallery modes are formed. Based on numerical calculations the mode structure are presented, as well as quality factor Q is estimated which can achieve up to 10^5.

I. Introduction

Optical resonators play an extremely important role in modern optics, being fundamental not only in any laser device [1–6], but also as etalons for optical filtering [7], as tools for very accurate measurements [8–13], and for nonlinear optics experiments [14].

One of the most difficult challenges in the design and fabrication of efficient integrated microresonator-based photonic devices is the coupling

of light into and out of a microresonator without compromising its narrow resonance line width. The most widely used microresonator coupling devices are evanescent-field couplers of various geometries such as prisms, tapered fibers, planar and photonic crystals waveguides, etc.

The very small size and strong optical confinement of integrated planar microdisk and microring resonators, which make them promising candidates for large-scale integration, also make them very sensitive to fabrication errors that can drastically spoil coupling efficiency. For example, if a circular microdisk is laterally coupled to a waveguide via a submicron-width air gap, the coupling efficiency strongly depends on the gap width. Accurate and repeatable fabrication of such narrow gaps by lithographic and etching techniques is a rather challenging task. The smaller the microdisk, the more difficult it is to control the coupling coefficient.

In this paper the simple structure of micro resonator with easy and controllablecoupling with externalexcitation wave is proposed (see Fig.1).

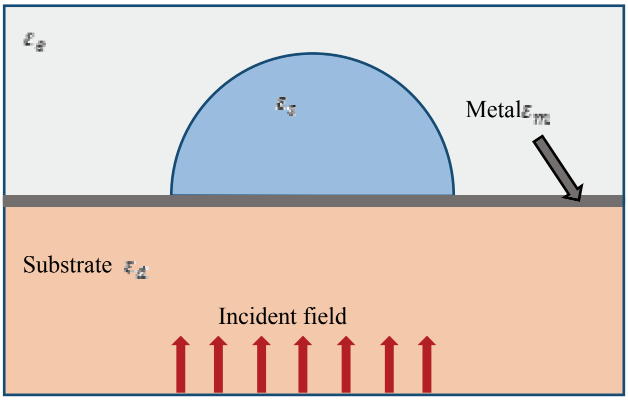


Fig. 1. Cross section of semicylindricalmicroresonator.

The considered structureconsists of dielectric substrate covered in top by fin metallic film on which placed another dielectric with semi cylindrical shape with relatively high refractive index.

As a result, a resonator is formed, which combines the properties of a Fabry-Perot resonator, where the input of wave energy is carried through mirrors and a cylindrical resonator, where whispering-gallery modes are formed.

Here, the possibility of simple input and output of radiation is combined with the possibility of using the unique properties of an evanescent wave on the cylindrical surface of a dielectric. Although the value of the quality factor of the proposed resonator (10^5) is inferior to the Q-factors of planar microdisk and microringmicroresonators, however, it can be quite sufficient for a wide range of studies.

It is noteworthy that the proposed microcavity can be upgraded by opening a gap in the metal layer near the axis of the semicylinder. The process of extraordinary radiation transmission through a subwavelength gap in a thin metal plate [15, 16] opens additional possibilities for controlling the input of radiation.

II. Results and Discussion

Let, ε_d, ε_m, ε_s and ε_β are the permittivities of the substrate, the metal layer, the semicylinder and the surrounding mediumrespectively, R-is the radius of the half-cylinder, and the h-thickness of the metal layer. We use the cylindrical coordinate system (ρ; φ; z), where z is directed along the axis of the semicylinder.

We determine the behavior of the wave fields using numerical calculations. Let's first consider the case when the electromagnetic wave, on the side of the dielectric substrate, incidence normally on to the structure (Fig. 1), the electric field strength of which is directed along the axis of the semicylinder. Numerical analysis was carried out for the following values of the parameters: $\varepsilon_d = 2,25$, $\varepsilon_s = 12,25$, $\varepsilon_\beta = 1$, $R = 1\mu n$, *h=50nm*, values of ε_m of silver has been chosen according to reference [17].

Three characteristic images for the field distributions E_z in modes with a relatively high Q are presented in Fig.2.

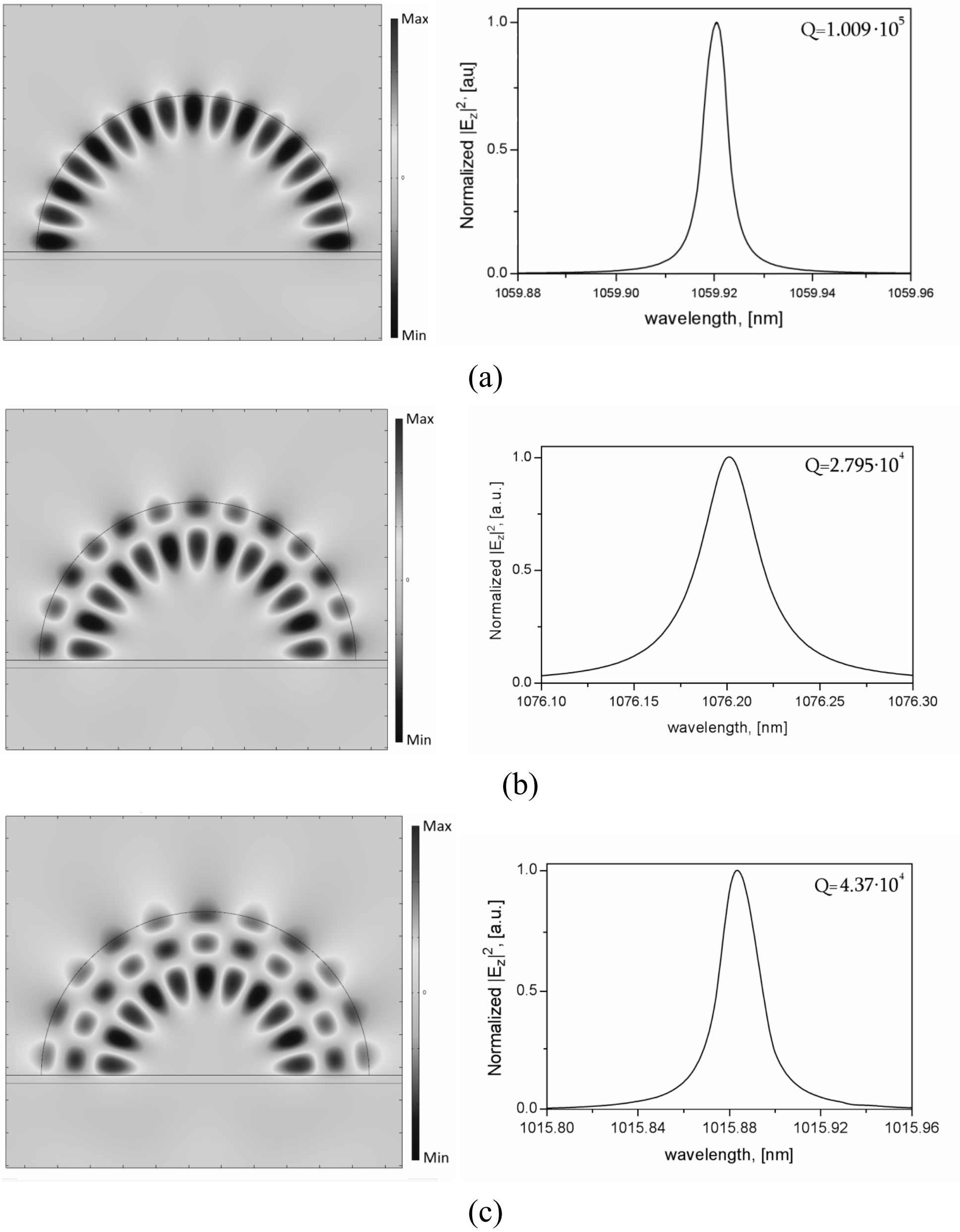


Fig. 2. The square of electric filed amplitudes distributions in microresonatorand resonance curves for different wavelength regions.

As it can be see from Fig.2 the mode structure is more complicated than in conventional Whispering-Gallery resonators. In some scenarios (see Fig.2 b, c) the mode which caring main part of stored energy are travelling relatively far from resonator ring edge.

It is easy to see, that in these modes the wave-field distribution has the form typical for cylindrical waves:

$$E_z = AJ_m\left(kp\right)\sin\ m\varphi e^{e\omega t}\ ,p < R,\ k = \sqrt{\varepsilon_s \frac{\omega}{c}} \tag{1}$$

Here $J_m\left(kp\right)$ is the Bessel function, ω is the frequency, A amplitude. For all three modes presented in Fig. 2 a large odd value of m (m = 17; 13; 11) is typically. It should be noted that the calculations carried out according Eq.(1) and the results obtained by numerical calculations perfectly correspond to each other.

The quality factor of the resonator on these modes can be determined by using the curve of the dependence of the square of the amplitude of the field on the length of the incident wave (Fig. 2).It reaches up to 10^5, which ensures the extreme sensitivity of the wave energy accumulated in the resonator from the values of the parameters. In particular, a noticeable change of the wave energy accumulated in the resonator with a change in the dielectric constant of the half-cylinder by $\Delta\varepsilon_s = 10^{-4}$ opens up wide possibilities for light control using various nonlinear and electro-optical effects (see Fig. 3).

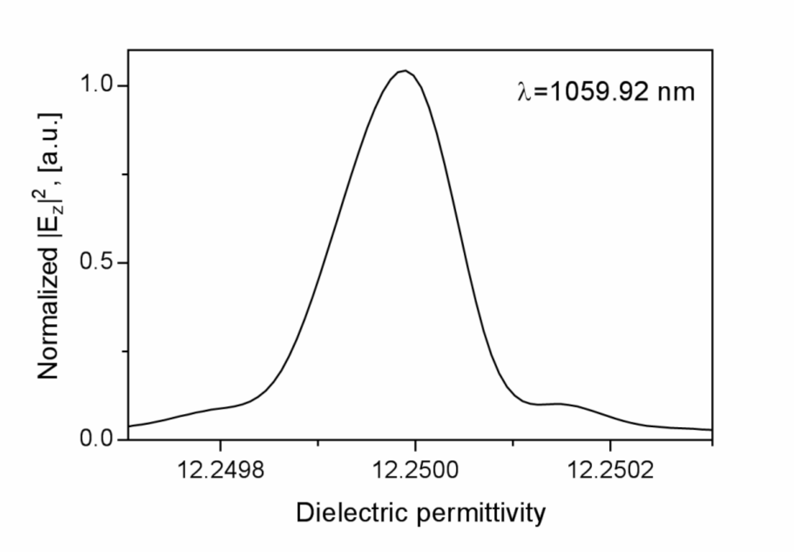


Fig. 3. Dependence ofthe square of electric filed amplitude on the dielectric constant of a half-cylinder for resonant wavelength λ = 1059.92 nm.

III. Conclusion

Thus, based on the dielectric / metal / insulator structure, an optical microresonator can be designed where the wave energy is stored in a semicylindrical dielectric with a relatively high permeability. Here, the exciting wave incidents from the side of another dielectric with plane-parallel boundaries and penetrates into the microcavity through a thin metal layer, thereby establishing favorable conditions for an easily realizable and controlled connection with the external wave. The structure consists of dielectric substrate covered in top by fin metallic film on which placed another dielectric with semi cylindrical shape with relatively high refractive index. The peculiarity of the proposed microresonatoris that it combines the properties as Fabry-Perot resonator, where the input of wave energy is carried through mirrors, as well as cylindrical resonator, where whispering-gallery modes are formed. Numerical calculations shows that

the quality factor can achieve up to 10^5, which is competitive with another types of high Q resonators such as Whispering-Gallery, especially to taking into account that the sizes of proposed structure can be much less. On the over hand it should be noted that the excitation of proposed resonator is much more easier and controllable. The high values of Q ensures the extreme sensitivity of the wave energy accumulated in the resonator from the values of the parameters. In particular, a noticeable change of the wave energy accumulated in the resonator with a change in the dielectric constant of the half-cylinder by $\Delta\varepsilon_s = 10^{-4}$ opens up wide possibilities for light control using various nonlinear and electro-optical effects.

REFERENCES

1. *Hall D. and Jackson P.* The Physics and Technology of Laser Resonators, Taylor and Francis (1989).
2. *Bykov V. and Silichev O.* Laser Resonators, Cambridge Intl. Science Publ.(1995).
3. *Kudryashov A. and Weber H.* Laser Resonators: Novel Design and Development(SPIE Press) 1999.
4. *Hodgson N. and Weber H.* Laser Resonators and Beam Propagation, 2nd edition Springer (2005).
5. *Yang L., Armani D.K. and Vahala K.J.* Appl. Phys. Lett., 83 825, (2003).
6. *Hoi P.V., Ha C.T.T. and Hung H.Q.* Appl. Phys. Lett., 87 161110, (2005).
7. *Dixit S.K.* Filtering Resonators, Nova Science Publishers (2001).
8. *Mamin H.J. and Rugar D.* Sub-attonewton force detection at millikelvin temperatures, Appl. Phys. Lett. 79, 3358–3360 (2001).

9. *Gavartin E., Verlot P. and Kippenberg T.J.* A hybrid on-chip optomechanical transducer for ultrasensitive force measurements, Nat. Nanotechnol. 7, 509–514 (2012).
10. *Jensen K., Kim K. and Zettl A.* An atomic-resolution nanomechanical mass sensor," Nat. Nanotechnol. 3, 533–537 (2008).
11. *Cleland A.N. and Roukes M.L.* A nanometre-scale mechanical electrometer, Nature 392, 160–162 (1998).
12. *Maekawa A., Noda M. and Shintani M.* Experimental study on a noncontact method using laser displacement sensors to measure vibration stress in piping systems, Measurement 79, 101–111 (2016).
13. *Krause A.G., Winger M., Blasius T.D., Lin Q. and Painter O.* A high resolution microchip optomechanical accelerometer, Nat. Photonics 6, 768–772 (2012).
14. *Grelu Ph.* (Editor), Nonlinear Optical Cavity Dynamics: From Microresonators to Fiber Lasers. Wiley, (2016).
15. *Agnès M., Simon F. and J-F.* Mercier, Enhanced transmission through gratings: Structural and geometrical effects, Phys. Rev. B 88, 115416 (2013).
16. *Anders P., Nerkararyan K.V.*, *Sahakyan K. and Bozhevolnyi S.I.* Enhanced nonresonant light transmission through subwavelength slits in metal, Opt. Lett. 41, 242–245 (2016).
17. *Johnson P.B. and Christy R.W.* Phys. Rev. B 6, 4370 (1972).

HO-DOPED LITHIUM NIOBATE THIN FILMS. GROWTH AND PROPERTIES.

E.Kokanyan[1,2]*, A.Movsesyan*[1,2]*, M.Bazzan*[3]*, I.Ghambaryan*[1,2]*, A.Eganyan*[1,2]*, A.Arzumanyan*[4]*, M.Aillerie*[5,6]*, N.Kokanyan*[5,6].

[1]Armenian State Pedagogical University After Kh. Abovyan, Tigran Mets Ave., 17, Yerevan, Armenia
[2]Institute for Physical Research, National Academy of Sciences of Armenia, 0203, Ashtarak, Armenia
[3]Physics and Astronomy Department, Universita di Padova, Padova, Italy
[4]Armenian Institute of Applied Chemistry “ARIAC” 0053, Yerevan, Armenia
[5]CentraleSupelec, LMOPS, 2 rue E. Belin, 57070 Metz, France
[6]Université de Lorraine, LMOPS, EA-4423, 2 rue E. Belin, 57070 Metz, France

Stoichiometric composition powders and alkoxides of lithium niobate doped with different concentration of Ho^{3+}ions were prepared by solid and wet reactions respectively. Thin films of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ were grown by Sol-Gel method on a sapphire substrate of (001) orientation. Obtained powders and fired alkoxides were investigated by X-ray diffraction analyses and corresponding lattice parameters were obtained. The structure of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ thin films was investigated by high resolution X-ray reciprocal space mapping.

Introduction

Lithium niobate is one of the most well-known and widely used ferroelectric material due to its unique non-linear optical, piezo- and

pyroelectric, electro-optical and photorefractive properties. It is widely used also in integrated optical, micro- and optoelectronic devices based on waveguides and thin film heterostructures. The material is well-known also as a multifunctional one providing a possibility of combining non-linear optical and lasing properties. Recently, on the base of investigation of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ crystals it was shown that to the multifunctionality of the material a possibility of optical cooling can be added [1].

Lithium niobate thin films have been created by different techniques such as sol-gel [2], vapor deposition [3], liquid phase epitaxy [4], molecular beam epitaxy [5], laser deposition [6]. It should be noted, that all the above mentioned thin films were exploited to prepare nominally pure lithium niobate.

In the current work we present results on synthesizing of Ho-doped lithium niobate powders and alkoxides, growth of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ thin films, X-ray diffraction analysis of obtained materials.

Experimental details

Stoichiometric composition lithium niobate powders doped with different concentrations of Ho^{3+} ions were synthesized at 1000°C in two steps by solid reactions given below:

$$2LiCO_3+Nb_2O_3\rightarrow 2LiNbO_3+CO_2\uparrow \quad (1)$$

$$2LiNbO_3+xHo_2O_3\rightarrow 2Li_{1-3x}Ho_xNbO_3+3xLi_2O\uparrow \quad (2)$$

For the growth of thin films complex alkoxides of lithium niobate with holmium were synthesized on the base of pre synthesized alkoxides of lithium and niobium, as well as holmium chloride.

Alkoxide of lithium was obtained using metallic lithium and 2-methoxyethanol:

$$2Li+2ROH \rightarrow 2LiOR+ H_2\uparrow \quad (3)$$

where R= CH_2 CH_2 OCH_3.

Alkoxide of niobium was obtained using niobium pentachloride, alcohol, ammonia gas and 2-methoxyethanol:

$$NbCl_5+5ROH+NH_3 \rightarrow Nb(OR)_5+5NH_4\,Cl \quad (4)$$

Equimolar amounts of obtained alkoxides (the precise amount of lithium alkoxide was defined by titration) were mixed as a solution and a complex solution of lithium niobate was obtained. The mixture was boiled during about 5-6 hours until it displayed the required density and viscosity. The obtained sol is stored in an atmosphere of dry argon. The required amount of impurity ion (Ho^{3+}) was added in a form of holmium chloride to the ready-made sol, heated during 3-4 hours and again stored in an atmosphere of dry argon.

The ready-made sol was cast on an optically polished 001 orientated sapphire substrate and spin-coated for about 30 sec with a speed of 4000rpm. During the spinning procedure the sol absorbs moisture and becomes a gel. The obtained thin film was put into a furnace at 200^{o}C for about 5 minutes. During the drying procedure a part of the organics volatilizes. After that the temperature in the furnace was increased with a speed of 100 ^{o} per hour till 500^{o}C and kept at that temperature during 30 minutes. The organics volatilizes completely and the film synthesized into a crystalline layer. In order to get larger thicknesses, the coating and drying procedures with a new portion of sols have been repeated. Three series of lithium niobate thin films with different thickness (70nm, 130nm and 300nm) and doped with different concentrations of Ho^{3+} ions (0.1mol% and 1.0mol%) were prepared.

X-ray diffraction experiments were carried out on the prepared Ho:$LiNbO_3$ powders with a diffractometer type “DrF-2.0” with a Cu Kα radiation at λ=1.5405 Å.

Structural modifications of obtained thin films were investigated by high-resolution x-ray reciprocal space mapping. Experiments were done with Philips X'Pert diffractometer equipped with a parabolic multilayer mirror and 4-bounce Ge (440) monochromator using a CuKα radiation. The detector was a Xe proportional counter with a three – bounces channel-cut Ge (440) analyzer. The reciprocal space maps were collected in the proximity of the symmetric (006) and asymmetric (018) Bragg reflections of the sapphire substrate. By comparing the maps obtained from different independent Bragg reflections, the deformation matrix was solved and lattice parameters of thin films were calculated.

Results and discussions

The X-ray diffraction patterns of synthesized $LiNbO_3$ powders of stoichiometric composition doped with different concentration of Ho^{3+} ions are given in the Fig.1. The obtained data confirm existence of no any other phase than lithium niobate. Using the X-ray diffraction patterns the lattice parameters of powders have been determined. Results are presented in the table 1. In the same table, lattice parameters of Ho-doped congruent composition lithium niobate are also presented.

Analyses of obtained results show that introduction of Ho^{3+} ions into the matrix of lithium niobate in the case of parameter "a" independently on the stoichiometry slightly increases with the increase of the concentration of the impurity ion. While in the case of parameter "c" it stays unchanged for stoichiometric lithium niobate and slightly decreases for congruent composition lithium niobate with the increase of the concentration of the impurity ion.

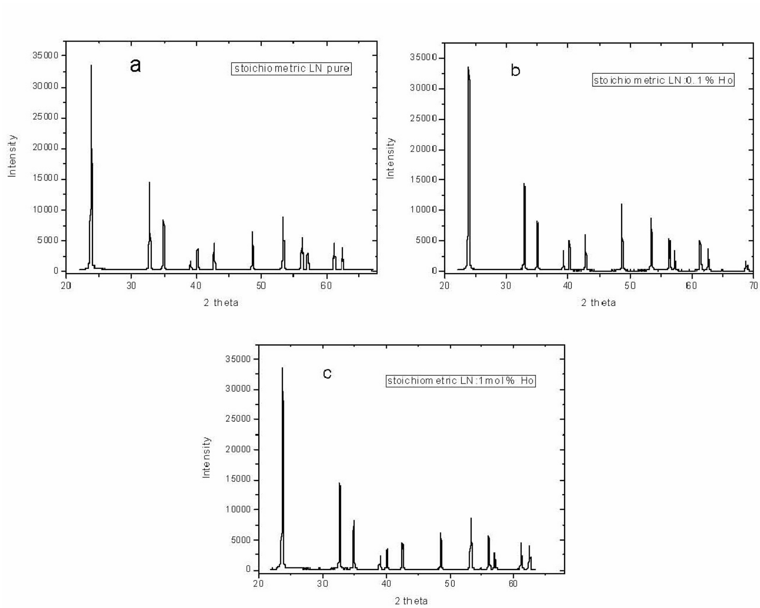


Fig. 1. X-ray diffraction patterns of synthesized $LiNbO_3$ powders of stoichiometric composition doped with different concentration (a-0mol%, b-0.1mol%, c-1.0mol%) of Ho^{3+} ions.

Table 1.

Lattice parameters of synthesized $LiNbO_3$ powders of stoichiometric and congruent composition doped with different concentration (a-0mol%, b-0.1mol%, c-1.0mol%) of Ho^{3+} ions.

	Powder lattice parameters			
	stoichiometric		congruent	
samples	a Å	c Å	a Å	c Å
LN pure	5,147	13,860	5,1545	13,8759
LN:0.1%Ho	5,149	13,859	5,1544	13,8736
LN:1% Ho	5,151	13,860	5,156	13,8692

The reason of this behavior is not completely clear yet. Probably such changes are due to different positions of Ho^{3+} ions in the lattice of the host material depending on the stoichiometry of the latter, as well as the concentration of the impurity ion. The last assumption is corroborated also by the results of Raman scattering experiment on Ho-doped lithium niobate crystals of congruent composition [7].

The X-ray diffraction pattern of Ho-doped lithium niobate alkoxide fired at 500°C for 3 hours is presented in fig. 2.

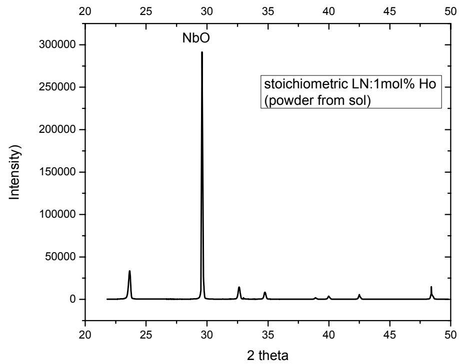


Fig. 2. X-ray diffraction pattern of fired ready-made Ho-doped lithium niobate alkoxide.

The obtained X-ray diffraction pattern shows that, besides $LiNbO_3$, an intense peak is present, indicating a considerable volume fraction of NbO. The reason of an existence of a peak of niobium oxide is due to a decomposition of the alkoxide to niobium and lithium oxides during the firing procedure and absence of conditions for complete resynthesizing of lithium niobate phase.

X-ray rocking curves of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ thin films on sapphire substrate presented in fig. 3 show the intense peak of sapphire corresponding to the reflection (006) of the substrate and, at lower angles, the peak of lithium niobate corresponding to reflection (006). The results confirm that the main volume of the crystalline films is epitaxially oriented with the “c” axis

parallel to the substrate normal. One can notice also that with a decrease of the thickness of the film (the number of layers) the lithium niobate peak intensity decreases, while its position is practically independent on Ho^{3+} ions concentration. It should be noticed, that for a thin film with a thickness of 70nm the peak corresponding to lithium niobate is negligibly small.

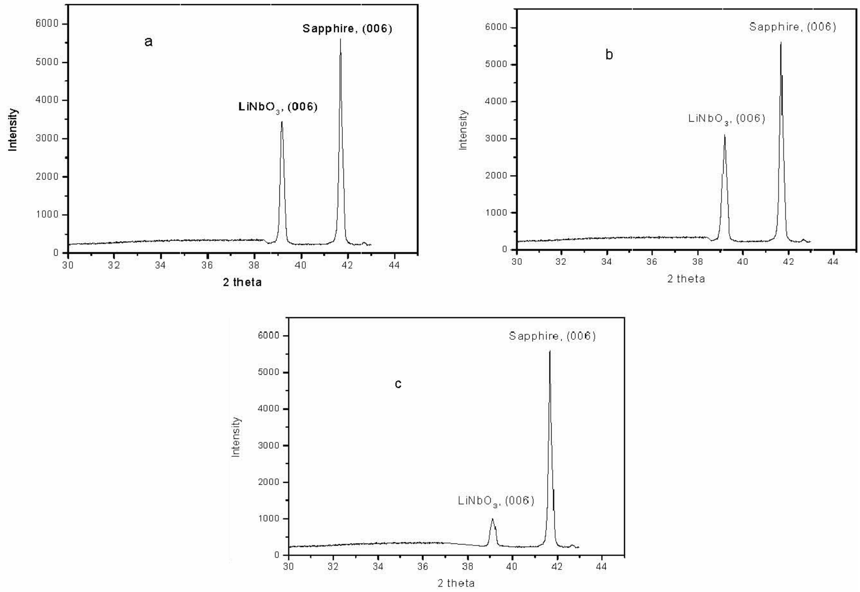


Fig. 3. X-ray diffraction patterns of thin films. with different thickness a) $LiNbO_3$:0.1mol%Ho^{3+}, thickness 300nm, b) $LiNbO_3$:1.0mol%Ho^{3+}, thickness 300nm, c) $LiNbO_3$:0.1mol%Ho^{3+}, thickness 130nm.

Calculated values of "a" and "c" lattice parameters of $LiNbO_3$:0.1mol% Ho^{3+} thin films with a nominal thickness of 300nm, on the base of results of high-resolution X-ray reciprocal space mapping (not shown), were equal respectively to 5.176±0.022 Å and 13.8659±0.0081 Å. The results show that, the structures of obtained films are, within experimental errors, the same as the LN:Ho powders. This indicates that the film is fully relaxed with respect to the sapphire substrate.

Conclusions

Conditions for syntheses of stoichiometric composition powders and alkoxide of lithium niobate doped with different concentration of Ho^{3+}ions by solid and wet reactions respectively and for the growth of $LiNbO_3:Ho^{3+}$ thin films by Sol-Gel method were found. An increase of the concentration of impurity Ho^{3+} ions in stoichiometric lithium niobate leads to an increase of the value of lattice parameter "a", while parameter "c" stays unchanged. The main part of crystalline $LiNbO_3:Ho^{3+}$ films is oriented with the (001) plane parallel to the surface of the sapphire substrate. The $LiNbO_3:Ho^{3+}$ thin films are in a fully relaxed state with respect to the underlying sapphire substrate.

REFERENCES

1. *G. Demirkhanyan, H. Demirkhanyan, E. Kokanyan, D. Sardar, M. Aillerie.* Journal of Contemporary Physics (Armenian Academy of Sciences) **51**, (2016) 28.
2. *V. Joshi, D. Roy, M.I. Mecarteny*, Appl. Phys. Lett. **63** (1993) 6.
3. *B.J. Curtis, H.R. Brunner*. Mater. Res. Bull. 1**0** (1975) 515.
4. *S. Miyazawa, S. Fushimi, S. Kondon*. Appl. Phys. Lett. **26** (1975) 8.
5. *B.A. Betts, C.W. Pitt*. Electron. Lett. **21** (1985) 960.
6. *W.S. Hu, Z.D. Liu, D. Feng*. Solid State Commun. **97** (1996) 481.
7. *N. Kokanyan, E. Kokanyan*. (to be published).

AHARONOV-BOHM EFFECT FOR FERMIONIC CURRENT IN TWO-DIMENSIONAL RINGS

A.A. Saharian

Department of Physics, Yerevan State University,
1 Alex Manoogian Street, 0025 Yerevan, Armenia

Abstract

We investigate the vacuum expectation value of the fermionic current induced by an external magnetic flux in a two-dimensional circular ring. On the ring edges the bag boundary conditions are imposed for the field operator. The radial current vanishes. The azimuthal current is decomposed into the boundary-free and boundary-induced contributions. The both of them are odd periodic functions of the magnetic flux, with the period equal to the flux quantum. The current density is peaked near the inner edge and, as a function of the field mass, exhibits quite different features for two inequivalent representations of the Clifford algebra. We show that, unlike the current in the boundary-free geometry, the vacuum current in the ring is a continuous function of the magnetic flux and vanishes for half-odd integer values of the flux in units of the flux quantum. Combining the results for two irreducible representations, we investigate the induced current in parity and time-reversal symmetric models. The corresponding results are applied to graphene rings.

1 Introduction

The Aharonov-Bohm effect [1] is among the most important topological effects in quantum phyiscs demonstrating the physical relevance of the vector potential. In addition to its fundamental significance, the Aharonov-Bohm effect has important applications in mesoscopic physics (see, for instance, [2]). The effect was originally observed in metal rings [3] and later also in carbon nanotubes [4]. The Aharonov-Bohm effect in graphene (and also in a number of planar condensed matter systems such as Weyl semimetals and topological insulators) is expected to exhibit unusual behavior due to the peculiar electronic properties. For these systems, the long-wavelength dynamics of excitations is formulated in terms of the Dirac-like theory living in (2+1)-dimensional spacetime where the role of the velocity of light is played by the Fermi velocity (for a review see [5]). Among other interesting features in (2+1)-dimensional models are flavour symmetry breaking, parity violation and fractionalization of quantum numbers.

In a number of field theoretical models, including the ones describing the condensed matter systems at large length scales, additional boundary conditions are imposed on the field operator. These conditions can have different physical origins. For example, in graphene nanotubes and nanoloops, because of the compactification of one or two spatial dimensions, the Dirac equation is supplemented by quasiperiodicity conditions along compact dimensions. Another type of graphene made structures in which additional boundary conditions are imposed are graphene nanoribbons, geometrically terminated single layers of graphite. The edge effects play a crucial role in electronic properties of nanoribbons. In particular, depending on the boundary conditions, a nonzero band gap may be generated.

The boundary conditions imposed on a quantum field modify the spectrum of zero-point fluctuations and, as a consequence, the vacuum expectation values (VEVs) of physical observables are changed. For charged fields, among the most important characteristics of the ground state is the

expectation value of the current density. The vacuum currents in spaces with nontrivial topology and with quasiperiodic boundary conditions on the field operator along compact dimensions have been investigated in [6] for the flat background geometry and in [7] and [8] for locally de Sitter and anti-de Sitter backgrounds. For the special case $D = 2$, the general results were applied to cylindrical and toroidal graphene nanotubes, within the framework of the effective Dirac theory. The influence of additional boundaries on the vacuum currents along compact dimensions has been discussed in [9] and [10] for locally Minkowski and anti-de Sitter backgrounds.

In the present paper we investigate the VEV of the fermionic current induced by a magnetic flux in a spatial region of (2+1)-dimensional spacetime bounded by two concentric circles. On the circles, bag boundary conditions are imposed. We assume that the flux is located inside the inner boundary and, consequently, its effect on the vacuum properties is of the Aharonov-Bohm type.

2 Geometry of the problem and the fermionic modes

We consider a quantum fermion field $\psi(x)$ in (2+1)-dimensional spacetime in the presence of external electromagnetic field with the vector potential A_μ. The dynamics is governed by the Dirac equation

$$(i\gamma^\mu D_\mu - sm)\psi(x) = 0,\ D_\mu = \partial_\mu + \Gamma_\mu + ieA_\mu, \tag{1}$$

where Γ_μ is the spin connection and e is the charge of the field quanta. The Dirac matrices γ^μ obey the Clifford algebra $\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}$ with $g_{\mu\nu}$ being the metric tensor for the background geometry. Here we consider (2+1)-dimensional flat spacetime described in polar coordinates $x^\mu = (t, r, \phi)$ with the metric tensor $g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(1, -1, -r^2)$. In (2+1) dimensions the Clifford algebra has two inequivalent irreducible representations with 2×2 matrices. Firstly we shall discuss the case of a fermionic field realizing the irreducible representation of the Clifford algebra. The parameter s in (1), with the values $s = +1$ and $s = -1$, corresponds to two different representations (see below). With these representations, the mass term violates both the parity (P-) and time-reversal (T-) invariances. The vacuum currents in the parity and time-reversal symmetric models will be discussed in section 4.

We assume that the field is confined in the spatial region bounded by two concentric circles having radii a and b, $a < b$. On the edges, the field operator obeys the MIT bag boundary conditions

$$(1 + in_\mu\gamma^\mu)\,\psi(x) = 0,\ r = a, b. \tag{2}$$

with n_μ being the outward pointing unit vector normal to the boundaries. In the region $a \leqslant r \leqslant b$ one has $n_\mu = n_u\delta^1_\mu$ for the boundary at $r = u$ with $n_a = -1$, $n_b = 1$. The boundary condition of the type (2) was used in the bag model of hadrons for the confinement of quarks.

For the Dirac matrices in cylindrical coordinates we take the representation $\gamma^0 = \mathrm{diag}(1, -1)$ and

$$\gamma^l = \frac{i^{2-l}}{r^{l-1}} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi} \\ (-1)^{l-1}e^{i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \tag{3}$$

for $l = 1, 2$. For the vector potential we will consider a configuration corresponding to the presence of a magnetic flux located in the region $r < a$. In the region under consideration, $a \leqslant r \leqslant b$, for the covariant components in the coordinates (t, r, ϕ) one has $A_\mu = (0, 0, A_2)$. For the magnetic flux threading the ring we have $\Phi = -2\pi A_2$. In the discussion below we will also use the parameter

$$\alpha = eA_2 = -\Phi/\Phi_0, \tag{4}$$

where $\Phi_0 = 2\pi/e$ is the flux quantum. Though the magnetic field strength for the gauge field configuration vanishes, the magnetic flux enclosed by the ring gives rise to Aharonov-Bohm-like effects on physical observables, in particular for the VEVs. Note that the distribution of the magnetic flux in

the region $r < a$ can be arbitrary. The boundary $r = a$ is impenetrable for the fermionic field and the effect of the gauge field is purely topological.

The zero-point fluctuations of the fermionic field $\psi(x)$ in the region $a \leqslant r \leqslant b$ are influenced by the magnetic flux threading the ring. As a consequence, the VEVs of physical quantities depend on the flux. This gives rise to a number of interesting physical phenomena, such as parity anomalies, formation of fermionic condensate and generation of quantum numbers. Here we are interested in the VEV of the fermionic current $\langle j^\mu(x)\rangle = e\langle 0|\bar{\psi}\gamma^\mu\psi|0\rangle$, where $|0\rangle$ stands for the vacuum state, $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$ is the Dirac adjoint and the dagger denotes Hermitian conjugation. Let $\{\psi_\sigma^{(+)}(x), \psi_\sigma^{(-)}(x)\}$ be the complete set of positive- and negative-energy fermionic modes, specified by a set of quantum numbers σ. The VEV of the current density is presented in the form of the mode sum

$$\langle j^\mu\rangle = -\frac{e}{2}\sum_\sigma\sum_{\kappa=-,+}\kappa\bar{\psi}_\sigma^{(\kappa)}(x)\gamma^\mu\psi_\sigma^{(\kappa)}(x). \tag{5}$$

For the geometry under consideration, the mode functions obeying the boundary condition at $r = a$ are written in the form [11]

$$\psi_\sigma^{(\kappa)}(x) = \left(\frac{\pi\gamma}{16aE}T_{\beta_j}^{ab}(b/a,\gamma a)\right)^{1/2} e^{-\kappa iEt+ij\phi}\begin{pmatrix}\sqrt{E+\kappa sm}\,g_{\beta_j,\beta_j}(\gamma a,\gamma r)\,e^{-i\phi/2}\\ \frac{\kappa\epsilon_j\gamma e^{i\phi/2}}{\sqrt{E+\kappa sm}}g_{\beta_j,\beta_j+\epsilon_j}(\gamma a,\gamma r)\end{pmatrix}, \tag{6}$$

with $E = \sqrt{\gamma^2+m^2}$, $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$, $\beta_j = |j+\alpha| - \epsilon_j/2$, $\epsilon_j = 1$ for $j > -\alpha$, $\epsilon_j = -1$ for $j \leqslant -\alpha$. In (6),

$$g_{\beta_j,\mu}(x,y) = Y_{\beta_j}^{(a)}(x)\,J_\mu(y) - J_{\beta_j}^{(a)}(x)\,Y_\mu(y), \tag{7}$$

where $J_\nu(x)$ and $Y_\nu(x)$ are the Bessel and Neumann functions and we use the notation

$$f_{\beta_j}^{(u)}(x) = xf'_{\beta_j}(x) + [n_u(\kappa\sqrt{x^2+m_u^2}+sm_u) - \epsilon_j\beta_j]f_{\beta_j}(x), \tag{8}$$

with $u = a, b$, $f = J, Y$, and $m_u = mu$. The modes (6) are eigenfunctions of the total angular momentum operator $\hat{J} = -i(\partial_2 + ieA) + \sigma_3/2$, for the eigenvalues $j + \alpha$.

From the boundary condition (2) at $r = b$ it follows that the eigenvalues for γ in the region $a \leqslant r \leqslant b$ are the roots of the equation

$$C_{\beta_j}(\eta,\gamma a) \equiv J_{\beta_j}^{(a)}(\gamma a)\,Y_{\beta_j}^{(b)}(\gamma b) - J_{\beta_j}^{(b)}(\gamma b)\,Y_{\beta_j}^{(a)}(\gamma a) = 0, \tag{9}$$

with $\eta = b/a$. The positive solutions of this equation with respect to γa will be denoted by z_l, $l = 1, 2, \ldots$, $z_l < z_{l+1}$. For the eigenvalues of γ one has $\gamma = \gamma_l = z_l/a$. The mode functions are specified by the quantum numbers $\sigma = (l, j)$.

For the complete specification of the mode functions (6) it remains to determine $T_{\beta_j}^{ab}(\eta,\gamma a)$. The latter is found from the standard orthonormalization condition and is given by the expression

$$\begin{aligned} T_{\beta_j}^{ab}(\eta,z) &= z\left[D_bJ_{\beta_j}^{(a)2}(z)/J_{\beta_j}^{(b)2}(\eta z) - D_a\right]^{-1}, \\ D_u &= u^2\frac{E+\kappa sm}{E}\left[E\left(E+\kappa n_u\frac{\epsilon_j\beta_j}{u}\right)+\kappa n_u\frac{E-\kappa sm}{2u}\right], \end{aligned} \tag{10}$$

with $u = a, b$ and $\gamma = z/a$.

3 Current density

By using the mode functions (6) it is seen that the mode-sum (5) for the radial component of the current density vanishes, $\langle j^1\rangle = 0$, and the only nonzero component corresponds to the azimuthal

current. For the physical component $\langle j_\phi \rangle = r\langle j^2 \rangle$ we get

$$\langle j_\phi \rangle = -\frac{\pi e}{16a^3} \sum_j \sum_{\kappa=\pm} \epsilon_j \sum_{l=1}^{\infty} T^{ab}_{\beta_j}(\eta, z_l) h(z_l). \tag{11}$$

where $\sum_j$ stands for the summation over $j = \pm 1/2, \pm 3/2, \ldots$, and

$$h(z) = z^2 \frac{g_{\beta_j,\beta_j}(z, zr/a)}{\sqrt{z^2/a^2 + m^2}} g_{\beta_j,\beta_j+\epsilon_j}(z, zr/a). \tag{12}$$

In (11), the eigenvalues z_l are given implicitly, as roots of (9), and this representation is not convenient for the further evaluation of the VEV. Another disadvantage is that the separate terms in the series are highly oscillating for large values of the quantum numbers.

These difficulties can be circumvented by using the Abel-Plana-type formula [12]

$$\sum_{l=1}^{\infty} h(z_l) T^{ab}_{\beta_j}(\eta, z_l) = \frac{4}{\pi^2} \int_0^\infty dz \, \frac{h(z)}{J^{(a)2}_{\beta_j}(z) + Y^{(a)2}_{\beta_j}(z)}$$
$$-\frac{1}{\pi} \int_0^\infty dz \sum_{p=\pm} \frac{h(ze^{pi\pi/2}) K^{(bp)}_{\beta_j}(\eta z)/K^{(ap)}_{\beta_j}(z)}{K^{(ap)}_{\beta_j}(z) I^{(bp)}_{\beta_j}(\eta z) - I^{(ap)}_{\beta_j}(z) K^{(bp)}_{\beta_j}(\eta z)}, \tag{13}$$

where we have introduced the notation

$$f^{(up)}_{\beta_j}(x) = x f'_{\beta_j}(x) + \{n_u[\kappa \sqrt{\left(xe^{p\pi i/2}\right)^2 + m_u^2} + s m_u] - \epsilon_j \beta_j\} f_{\beta_j}(x), \tag{14}$$

with $f = I, K$ for the modified Bessel functions $I_{\beta_j}(x)$ and $K_{\beta_j}(x)$. The last term in (13) vanishes in the limit $b \to \infty$. From here it follows that the part in the current density coming from the first integral in the right-hand side of (13) is the current density in the region $r \geqslant a$ for the geometry of a single boundary at $r = a$. We denote that part by $\langle j_\phi \rangle_a$. It is further decomposed as

$$\langle j_\phi \rangle_a = \langle j_\phi \rangle_0 + \langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})}, \tag{15}$$

where

$$\langle j_\phi \rangle_0 = -\frac{e}{2\pi} \sum_j \epsilon_j \int_0^\infty dx \, x^2 \frac{J_{\beta_j}(rx) J_{\beta_j+\epsilon_j}(rx)}{\sqrt{x^2 + m^2}},$$
$$\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})} = \frac{e}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=\pm} p \int_m^\infty dx \, \frac{x^2}{\sqrt{x^2 - m^2}} \mathrm{Re}\left[\frac{I^{(a)}_{n_p}(ax)}{K^{(a)}_{n_p}(ax)}\right] K_{n_p}(rx) K_{n_p+1}(rx). \tag{16}$$

with $n_p = n + p\alpha_0$. Here α_0 is defined by the relation $\alpha = N + \alpha_0$, $|\alpha_0| \leqslant 1/2$, where N is an integer and we have defined the notation

$$f^{(u)}_{n_p}(z) = \delta_f z f_{n_p+1}(z) + n_u(s m_u + i\sqrt{z^2 - m_u^2}) f_{n_p}(z), \tag{17}$$

for $f = I, K$, $\delta_I = 1$ and $\delta_K = -1$. For α different from a half-odd integer, the part $\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})}$ vanishes in the limit $a \to 0$ and, hence, in this case $\langle j_\phi \rangle_0$ is interpreted as the current density in two dimensional space without boundaries. Respectively, the part $\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})}$ presents the contribution induced in the region $r \geqslant a$ by a single boundary at $r = a$.

After the application of (13) to (11), the current density is presented as

$$\langle j_\phi \rangle = \langle j_\phi \rangle_0 + \langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})} - \frac{e}{\pi^2} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{p=\pm} p \int_m^\infty dx \, \frac{x^2}{\sqrt{x^2-m^2}} \times \mathrm{Re} \left[\frac{K_{n_p}^{(b)}(bx)}{K_{n_p}^{(a)}(ax)} \frac{G_{n_p,n_p}^{(a)}(ax,rx) G_{n_p,n_p+1}^{(a)}(ax,rx)}{K_{n_p}^{(a)}(ax) I_{n_p}^{(b)}(bx) - I_{n_p}^{(a)}(ax) K_{n_p}^{(b)}(bx)} \right], \tag{18}$$

with the function

$$G_{\nu,\mu}^{(u)}(x,y) = K_\nu^{(u)}(x) I_\mu(y) - (-1)^{\mu-\nu} I_\nu^{(u)}(x) K_\mu(y). \tag{19}$$

This representation shows that the current density does not depend on the integer part N and is an odd function of the fractional part α_0. For a massless field and at large distances from the boundary, $r \gg a$, the single boundary-induced contribution $\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})}$ behaves as $(a/r)^{4-4|\alpha_0|}$, $|\alpha_0| < 1/2$, with the sign $\mathrm{sgn}(\alpha_0)\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})}/e < 0$. In this limit, the total VEV in the geometry of a single boundary is dominated by the boundary-free part. In the case of a massive field, at distances $r \gg a, m^{-1}$, one has $\langle j_\phi \rangle_a^{(\mathrm{b})} \sim e^{-2mr}/r^{3/2}$ and the boundary-induced contribution is of the same order as the boundary-free one.

The boundary-free part $\langle j_\phi \rangle_0$ does not depend on the parameter s and, hence, on the irreducible representation of the Clifford algebra in (2+1)-dimensional spacetime. A more convenient expression for this part is provided in [13]

$$\langle j_\phi \rangle_0 = \frac{e \sin(\pi \alpha_0)}{4\pi^2 r^2} \int_0^\infty dz \, \frac{\cosh(2\alpha_0 z)}{\cosh^3 z} \frac{1 + 2mr\cosh z}{e^{2mr\cosh z}}. \tag{20}$$

An alternative expression is given in [14]. For a massive field, at distances $mr \gg 1$, it behaves as $e^{-2mr}/r^{3/2}$. Near the origin $\langle j_\phi \rangle_0 \sim 1/r^2$. The part $\langle j_\phi \rangle_0$, is discontinuous at half-odd integer values of α:

$$\lim_{\alpha_0 \to \pm 1/2} \langle j_\phi \rangle_0 = \pm \frac{em}{2\pi^2 r} K_1(2mr). \tag{21}$$

In particular, for a massless field for the discontinuity one has $e/(2\pi^2 r^2)$.

Both the terms in the right-hand side of (15) are discontinuous at half-odd integer values of the parameter α. However, the total current density in the region $r > a$ for the geometry of a single boundary vanishes in the limits $\alpha_0 \to \pm 1/2$ and it is continuous. It can be checked that the last term in the right-hand side of (18) vanishes for $\alpha_0 \to \pm 1/2$. Hence, we conclude that the current density in the ring is a continuous function of the magnetic flux including the points corresponding to the half-odd integer values of the magnetic flux in units of the flux quantum.

Let us consider numerical examples. The behavior of the current density in the region $a \leqslant r \leqslant b$ as a function of the radial coordinate and of the parameter α_0 is presented in figure 1. The left panel is plotted for a massless field and for the magnetic flux parameter $\alpha_0 = 1/4$. In this panel, the numbers near the full curves are the values of the ratio b/a and the dashed curve presents the current density in the geometry of a single boundary at $r = a$. The full curves in the right panel are plotted for $b/a = 8$, $r/a = 2$, $ma = 0.1$ and the numbers near them are the values of the parameter s. The dashed curve in the right panel corresponds to the current density for a massless field for the same values of b/a and r/a. The current density is finite on the edges. The graphs show that the current density is peaked near the inner edge and it decreases with decreasing the width of the ring.

The dependence of the current density on the mass is plotted in figure 2 for the irreducible representations $s = 1$ (left panel) and $s = -1$ (right panel) and for the values of the parameters $\alpha_0 = 1/4$, $b/a = 8$, $r/a = 2$. The dashed curves present the charge density in the geometry of a single boundary at $r = a$. The dotted line in the right panel is the current density in the boundary-free problem. We see an essentially different behavior of the current density for the representations $s = 1$ and $s = -1$,

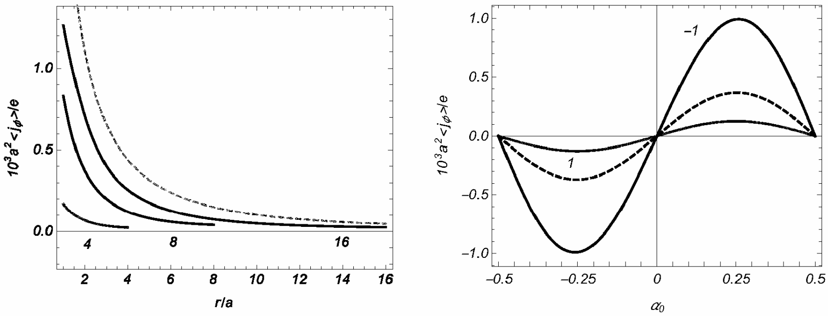


Figure 1: Current density in the region between two boundaries as a function of the radial coordinate for a massless field (left panel) and as a function of the parameter α_0 (right panel). The left panel is plotted for the magnetic flux parameter $\alpha_0 = 1/4$ and the numbers near the curves are the values of b/a. The full curves in the right panel are plotted for $ma = 0.1$, $b/a = 8$, $r/a = 2$ and the numbers near the curves are the values of s. The dashed curve in the right panel corresponds to a massless field.

as a function of the field mass. With the initial increase of the mass from the zero value, the modulus for the current density decreases for the irreducible representation with $s = 1$ and increases for the one with $s = -1$. With further increase of the mass the current is suppressed in both cases.

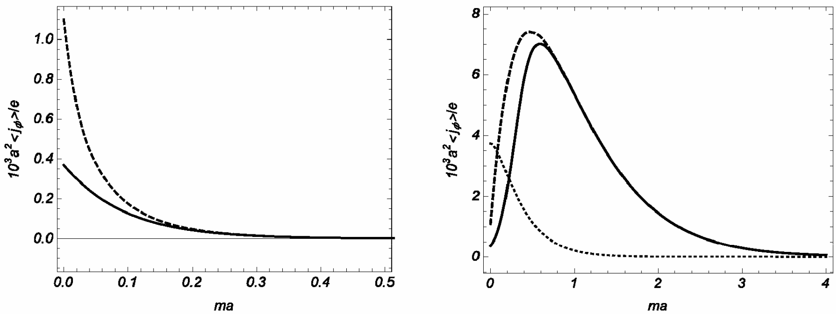


Figure 2: Current density versus the field mass for the fields with $s = 1$ (left panel) and $s = -1$ (right panel) and for $\alpha_0 = 1/4$, $b/a = 8$, $r/a = 2$. The dashed curves present the current density outside a single boundary at $r = a$ and the dotted line is the current density in the boundary-free geometry.

4 Current density in P- and T-symmetric models

In (2+1) dimensions the irreducible representations for the Clifford algebra are realized by 2×2 matrices. In cylindrical coordinates, the matrix γ^2 can be chosen in two inequivalent ways: $\gamma^2 = \gamma^2_{(s)} = -is\gamma^0\gamma^1/r$, $s = \pm 1$. The matrices (3) correspond to the representation with the upper sign. Two sets of Dirac matrices $\gamma^\mu_{(s)} = (\gamma^0, \gamma^1, \gamma^2_{(s)})$ realize two inequivalent irreducible representations of the Clifford algebra. In these representations, the mass term in the Lagrangian density for a two-component spinor

field, $L_s = \bar{\psi}_{(s)}(i\gamma^{\mu}_{(s)}D_{\mu}-m)\psi_{(s)}$, is not invariant under the P- and T-transformations. Here we assume that both the fields $\psi_{(s)}$ obey boundary conditions (2) with $\gamma^{\mu} = \gamma^{\mu}_{(s)}$. In order to recover the P- and T-invariances, we can consider the combined Lagrangian density $L = \sum_{s=\pm 1} L_s$. By appropriate transformations of the fields $\psi_{(s)}$, this Lagrangian is invariant under P- and T-transformations (in the absence of magnetic fields).

In order to relate the fields $\psi_{(s)}$ to the ones we have considered in the evaluation of the vacuum densities, let us introduce new two-component fields $\psi'_{(s)}$ in accordance with $\psi'_{(+1)} = \psi_{(+1)}$, $\psi'_{(-1)} = \gamma^0\gamma^1\psi_{(-1)}$. The Lagrangian density is presented as $L = \sum_{s=\pm 1} \bar{\psi}'_{(s)}(i\gamma^{\mu}D_{\mu}-sm)\psi'_{(s)}$, where $\gamma^{\mu} = \gamma^{\mu}_{(+1)}$. This shows that the equations for the fields with $s = -1$ and $s = +1$ differ by the sign of the mass term and coincide with (1). The fields $\psi'_{(s)}$ obey the conditions

$$(1 + isn_{\mu}\gamma^{\mu})\,\psi'_{(s)}(x) = 0, \tag{22}$$

on $r = a, b$. As it is seen, the field $\psi'_{(+1)}$ obeys the condition (2), whereas the boundary condition for the field $\psi'_{(-1)}$ differs by the sign of the term with the normal to the boundary. Combining 2-component spinors ψ'_{+} and ψ'_{-} in a 4-component one, $\Psi = (\psi'_{+}, \psi'_{-})^T$, and introducing 4×4 Dirac matrices $\gamma^{\mu}_{(4)} = \sigma_3 \otimes \gamma^{\mu}$, the Lagrangian density is rewritten in the form

$$L = \bar{\Psi}(i\gamma^{\mu}_{(4)}D_{\mu} - m)\Psi. \tag{23}$$

In this reducible representation, the boundary conditions are combined as $(1 + in_{\mu}\gamma^{\mu}_{(4)})\Psi(x) = 0$. The latter has the form of the standard MIT bag condition for a 4-component spinor.

By taking into account that $\bar{\psi}_{(s)}\gamma^{\mu}_{(s)}\psi_{(s)} = \bar{\psi}'_{(s)}\gamma^{\mu}\psi'_{(s)}$, for the total VEV of the current density one gets

$$\langle J^{\mu}\rangle = e\sum_{s=\pm 1}\langle\bar{\psi}_{(s)}\gamma^{\mu}_{(s)}\psi_{(s)}\rangle = e\sum_{s=\pm 1}\langle\bar{\psi}'_{(s)}\gamma^{\mu}\psi'_{(s)}\rangle. \tag{24}$$

The current density for the field $\psi_{(+1)}$ is obtained from the expressions given in the previous sections with $s = 1$. In order to find the VEV for the field $\psi'_{(-1)}$, we note that it obeys the field equation (1) with $s = -1$ and the boundary condition that differs from (2) by the sign of the term containing the normal to the boundaries. Consequently, the VEV $\langle\bar{\psi}'_{(-1)}\gamma^{\mu}\psi'_{(-1)}\rangle$ is obtained from the corresponding formulas given above taking $s = -1$ and making the replacement $n_u \to -n_u$, $u = a, b$. In the final formulas this replacement is made through the definition (17) for $f = I, K$. From here we conclude that the expressions for the VEV $\langle\bar{\psi}'_{(s)}\gamma^2\psi'_{(s)}\rangle$ is given by the formulas in section 3 where now we should take

$$f^{(u)}_{n_p}(z) = \delta_f z f_{n_p+1}(z) + n_u(m_u + si\sqrt{z^2 - m_u^2})f_{n_p}(z)\,. \tag{25}$$

with $n_a = -1$, $n_b = 1$. Assuming that the masses m for the fields with $s = +1$ and $s = -1$ are the same, we can see that the contributions from the fields $\psi'_{(+1)}$ and $\psi'_{(-1)}$ to the current density coincide for both the boundary-free and boundary-induced parts. The corresponding expressions for the total current are obtained from those in the previous section for the case $s = 1$ with an additional factor 2.

The results obtained above can be applied for the investigation of the ground state current density in graphene rings. Graphene is a monolayer of carbon atoms with honeycomb lattice containing two triangular sublattices A and B related by inversion symmetry. The electronic subsystem in a graphene sheet is among the most popular realizations of the Dirac physics in two spatial dimensions. For a given value of spin $S = \pm 1$, the corresponding long wavelength excitations are described in terms of 4-component spinors $\Psi_S = (\psi_{+,AS}, \psi_{+,BS}, \psi_{-,AS}, \psi_{-,BS})^T$ with the Lagrangian (in the standard units)

$$L = \sum_{S=\pm 1}\bar{\Psi}_S(i\hbar\gamma^0\partial_t + i\hbar v_F\gamma^l D_l - \Delta)\Psi_S. \tag{26}$$

Here, $D_l = (\nabla - ie\mathbf{A}/\hbar c)_l$, $l = 1, 2$, is the spatial part of the gauge extended covariant derivative and $e = -|e|$ for electrons. The Fermi velocity v_F plays the role of the speed of light. The components $\psi_{\pm,AS}$ and $\psi_{\pm,BS}$ of the spinor Ψ_S give the amplitude of the electron wave function on sublattices A and B. The indices $+$ and $-$ of these components correspond to inequivalent points, $\mathbf{K}_+$ and $\mathbf{K}_-$, at the corners of the two-dimensional Brillouin zone (see [5]). The energy gap Δ in (26) is related to the corresponding Dirac mass as $\Delta = mv_F^2$. It plays an important role in many physical applications (for the mechanisms of the gap generation in the energy spectrum of graphene see, for example, [5] and references therein). Depending of the physical mechanism for the generation, the energy gap may take values in the range $1\,\text{meV} \lesssim \Delta \lesssim 1\,\text{eV}$.

Comparing with the discussion above, we see that the values of the parameter $s = +1$ and $s = -1$ correspond to the $\mathbf{K}_+$ and $\mathbf{K}_-$ points of the graphene Brillouin zone and the Lagrangian density (26) is the analog of (23). From here we conclude that, for a given value of the spin S, the expression for the VEV of the current density for separate contributions coming from the points $\mathbf{K}_+$ and $\mathbf{K}_-$ are obtained from the formulas in previous sections by the replacement $m \to \Delta/(\hbar v_F)$. In the expressions for the current density, an additional factor v_F should be added, because now the operator of the spatial components of the current density is defined as $j^\mu = ev_F\bar{\psi}(x)\gamma^\mu\psi(x)$, $\mu = 1, 2$. For a given spin S, the contributions from two valleys are combined in accordance with Eq. (24).

5 Conclusion

We have discussed the combined effects from the magnetic flux and boundaries on the VEV of the current density in a two-dimensional circular ring. The examples of graphene nanoriboons and rings have already shown that the edge effects have important consequences on the physical properties of planar systems. In the problem at hand, for the field operator on the ring edges we have imposed the bag boundary conditions. The distribution of the magnetic flux inside the inner edge can be arbitrary. The boundary separating the ring from the region of the location for the gauge field strength is impenetrable for the fermionic field and the effect of the gauge field is purely topological. It depends on the total flux alone. The latter gives rise the Aharonov-Bohm effect for physical characteristics of the ground state. The consideration is done for both irreducible representations of the Clifford algebra in (2+1) dimensions. In these representations the mass term in the Dirac equation breaks the parity and time-reversal invariances. For the evaluation of the VEV we have employed the method based on the direct summation over a complete set of fermionic modes in the ring.

The VEV for the current density is decomposed into boundary-free, single boundary-induced and the second boundary-induced contributions. All them are odd periodic functions of the magnetic flux with the period equal to the flux quantum. Unlike the case of the boundary-free geometry, the current density in the ring is continuous at half-odd integer values for the ratio of the magnetic flux to the flux quantum, and it vanishes at these points. We have shown that the behaviour of the VEV, as a function of the field mass (energy gap in field theoretical models of planar condensed matter system) is essentially different for the cases $s = 1$ and $s = -1$.

The current density in parity and time-reversal models is obtained combining the results for the separate cases with $s = 1$ and $s = -1$. These models can be formulated in terms of four-component spinors constructed from the 2-component spinors realizing the two different irreducible representations. Assuming that both these spinors obey the boundary condition (2) and have the same mass, the resulting current density is obtained from the expressions given in section 3 with the additional factor 2. For the graphene circular rings, an additional factor 2 comes from the spin degree of freedom.

References

[1] Y. Aharonov, D. Bohm, Phys. Rev. **115**, 485 (1959).

[2] J. Schelter, P. Recher, B. Trauzette, Solid State Comm. **152**, 1411 (2012).

[3] R. A. Webb, S. Washburn, C.P. Umbach, R.B. Laibowitz, Phys. Rev. Lett. **54**, 2696 (1985).

[4] A. Bachtold, C. Strunk, J.-P. Salvetat, J.-M. Bonard, L.Forro, T.Nussbaumer, C. Schönenberger, Nature **397**, 673 (1999).

[5] V.P. Gusynin, S.G. Sharapov, and J.P. Carbotte, Int. J. Mod. Phys. B **21**, 4611 (2007); A.H. Castro Neto, F. Guinea, N.M.R. Peres, K.S. Novoselov, and A.K. Geim, Rev. Mod. Phys. **81**, 109 (2009).

[6] S. Bellucci and A.A. Saharian, Phys. Rev. D **79**, 085019 (2009); S. Bellucci, A.A. Saharian, and V.M. Bardeghyan, Phys. Rev. D **82**, 065011 (2010).

[7] S. Bellucci, A.A. Saharian, and H.A. Nersisyan, Phys. Rev. D **88**, 024028 (2013).

[8] E.R. Bezerra de Mello, A.A. Saharian, and V. Vardanyan, Phys. Lett. B **741**, 155 (2015).

[9] S. Bellucci and A.A. Saharian, Phys. Rev. D **87**, 025005 (2013); S. Bellucci, A.A. Saharian, and N.A. Saharyan, Eur. Phys. J. C **75**, 378 (2015).

[10] S. Bellucci, A.A. Saharian, and V. Vardanyan, JHEP **11** (2015) 092; S. Bellucci, A.A. Saharian, and V. Vardanyan, Phys. Rev. D **93**, 084011 (2016).

[11] S. Bellucci, A.A. Saharian, A.Kh. Grigoryan, Phys. Rev. D **94**, 105007 (2016).

[12] A.A. Saharian, *The Generalized Abel-Plana Formula with Applications to Bessel Functions and Casimir Effect* (Yerevan State University Publishing House, Yerevan, 2008); Preprint ICTP/2007/082; arXiv:0708.1187.

[13] E. R. Bezerra de Mello, V. Bezerra, A.A. Saharian, and V.M. Bardeghyan, Phys. Rev. D 82, 085033 (2010).

[14] E.G. Flekkøy and J.M. Leinaas, Int. J. Mod. Phys. A **6**, 5327 (1991).

MAGNETORESISTANCE AHARONOV-BOHM OSCILLATIONS IN OBLATE ELLIPSOIDAL QUANTUM DOTS

K.M. Gambaryan, V.G. Harutyunyan, V.M. Aroutiounian, L.S. Yeranyan

Department of Physics of Semiconductors and Microelectronics, Yerevan State University, 1 Alex Manoukyan, Yerevan 0025, Armenia

**E-mail: kgambaryan@ysu.am*

Abstract. The type-II InAsSbP ellipsoidal quantum dots (QDs) are nucleated on InAs substrate from In-As-Sb-P quaternary melt-solution using Stranski–Krastanow growth mode. The structures under consideration were prepared in the form of photoconductive cells. Magnetospectroscopy is used to measure the QDs structure's electric sheet resistance in magnetic field at lateral current flow. The magnetoresistance Aharonov–Bohm (MAB) oscillations with the period of $\delta B \approx 0.4$ T are found. No temperature dependence is experimentally revealed for the period of MAB. It is shown the QDs size distribution strongly acts on the period of MAB oscillations. The values for both major and minor semiaxes of ellipsoidal QDs were theoretically calculated using an equation for the period of classical Aharonov-Bohm oscillations. Comparison of calculated and experimentally measured values shows that they are coincide with high accuracy. Additionally, the temperature dependant hysteresis on magnetoresistance curves is revealed.

1. Introduction

Three-dimensional confinement of carriers in a quantum dot (QD) transforms the continuous optical spectrum of a bulk semiconductor into a size-tunable, atomic-like spectrum featuring a series of sharp peaks associated with discrete electronic transitions. These unique electronic and optical properties of QDs have been exploited for a wide range of applications, including quantum electronics and quantum information processing [1, 2], optical communications, display technologies, solar energy harvesting and fluorescent labelling etc. [3]. No classical states of light also can be generated using semiconductor QDs [3-5], enabling on-chip semiconductor quantum optics. Among quantum size objects' fabrication techniques, when the difference between lattice constants of the growing materials is 3-10%, the self-organized Stranski–Krastanow (S–K) method can be realized, by which dislocation-free nanostructures can be produced [7]. In a strained film, the formation of islands is energetically favourable, as it reduces the strain energy in the crystal [8]. The fabrication and characterization of epitaxially-grown semiconductor QDs had advanced to the point that QD-based devices were realizable. Despite the rapid progress in this field, numerous questions remain with regard to how QD morphology affects the electronic and optical properties and coherent light-matter interactions in semiconductor QDs. The performance of QD-based devices relying on these interactions is typically limited by multiple effects that are still not understood: 1) short coherence and relaxation times due to interactions of the charge carriers with each other and the local environment; 2) sensitivity of the QD properties on size and confinement; and 3) the presence of many-body interactions that often dominate the linear and nonlinear optical response [3].

In classical mechanics, the electromagnetic potentials (φ and $\vec{A}$) first were introduced as a pure mathematical notions for calculating the fields. And the fundamental equations of motion

can be expressed only in terms of fields. But in quantum mechanics the equation of motion of a particle are replaced by the Schrodinger equation for a wave, which cannot be expressed in terms of the fields alone, but also requires the electromagnetic potentials [9].

In this paper, actually we are experimentally revealed the magnetoresistance oscillations in InAsSbP type-II QDs due to Aharonov-Bohm effect. Additionally, theoretical calculations of QDs lateral dimensions using the measured period of MAB oscillations are performed.

2. Basic theory

The A-B phase is most simply described as the phase that appears in charged particle's wave function during its passage through the region where magnetic flux exists, but no effects of classical Lorentz force is present. In semiconductor nanostructures, such as type-II quantum dots or quantum rings, applied magnetic field penetrating the area surrounded by their trajectories will cause a phase shift of the constituent particle [10]. At zero magnetic field exciton ground state has zero angular momentum projection (L=0), but with increasing magnetic flux its changes to states with higher angular momentum (L = −1,−2,−3), causing oscillation of ground state energy of the charge carrier (figure 1*c*) [11].

Assuming that electron and hole move with different radii and the interaction between them is negligible, in the presence of external magnetic field, the energy of the electron-hole pair will be [9]:

$$E_{exc} = E_g + \frac{\hbar^2}{2m_e R_e^2}\left(l_e + \frac{\Phi_e}{\Phi_0}\right)^2 + \frac{\hbar^2}{2m_h R_h^2}\left(l_h - \frac{\Phi_h}{\Phi_0}\right)^2, \tag{1}$$

where $E_g$includes the band gap and confinement energies and is the magnetic field-independent term, $R_{e(h)}$ is the rotation radius of the electron (hole), l_e and l_h are the angular momentum (magnetic quantum numbers) of the electron and hole, respectively, Φ_0 is the flux quantum: $\Phi_0 = h/e$ and Φ_e and Φ_h magnetic fluxes are equal to $\Phi_e = \pi R_e^2 B$ and $\Phi_h = \pi R_h^2 B$, respectively. Now, taking in account strong Coulomb interaction, when they will rotate together as shown in Fig. 1(b), the exciton spectrum becomes [12]

$$E_{exc} = E_g + \frac{\hbar^2}{2MR_0^2}\left(L + \frac{\Delta\Phi}{\Phi_0}\right)^2, \tag{2}$$

where $L = l_e + l_h$ is the total momentum of an exciton, $R_0 = (R_h + R_e)/2$, and $M = (m_e R_e^2 + m_h R_h^2)/R_0^2$. Magnetic flux between the trajectories of the particles equals to:

$$\Delta\Phi = \Phi_e - \Phi_h = \pi B(R_e^2 - R_h^2). \tag{3}$$

In case of type-II QDs with strongly confined holes, we can assume that $R_h \to 0$, therefore $MR_0^2 = m_e R_e^2$ and $\Delta\Phi = \Phi_e$.

In direct-gap semiconductors emission process requires the total angular momentum to be equal 0. Since l_h = 0, all ground states of the electron in the conduction band with l_e = −1, −2, −3... states are dark. Hence, the exciton emission from cylindrical type-II QDs in magnetic field will be blocked for $B > B_{AB}$, where B_{AB} corresponds to the field at which the electron ground

state energy passes from $l_e = 0$ to $l_e = -1$. However, in real systems due to the presence of defects in QDs, above described mechanism for emission may not take place.

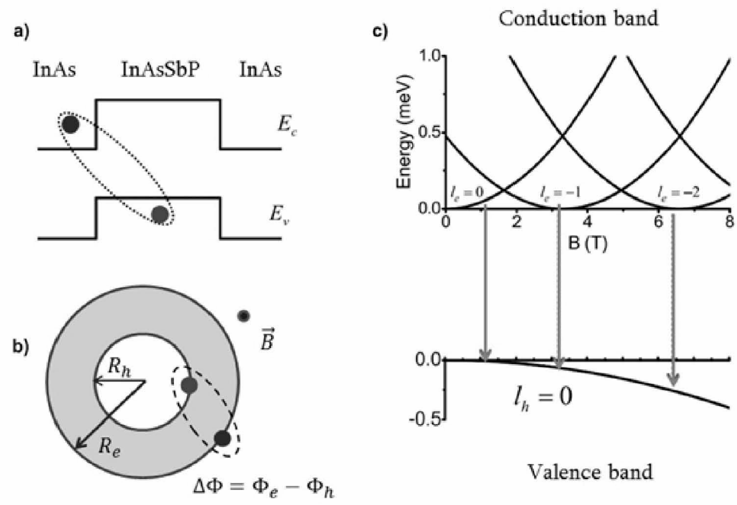


Figure 1. Schematic band structure of type-II QD – (*a*). The sketch of an electron-hole pair in type-II quantum dot – (*b*). The system energy spectra in magnetic field – (*c*).

3. Experimental details

Investigated InAsSbP type-II QDs were grown on industrial undoped n-InAs(100) substrate by liquid phase epitaxy (LPE) using the Stranski–Krastanow growth mode at T=550^{o}C constant temperature. The atomic force microscope (AFM «TM Microscopes–Autoprobe CP») and «Keithley-6514 System Electrometer» were used for morphological characterization and magnetospectroscopy, respectively. AFM images of ellipsoidal QDs which are under consideration are presented in figure 2.

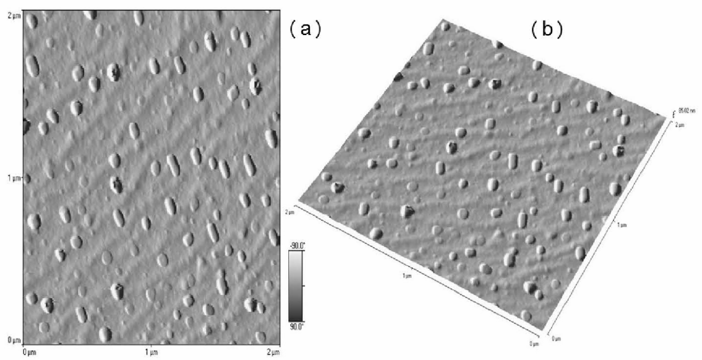


Figure 2. AFM images of InAsSbP type-II ellipsoidal QDs in plane – (*a*) and oblique – (*b*) view.

According to the InAs–InSb–InP phase diagram, concentrations of antimony and phosphorus in the growth solution were chosen to provide a lattice mismatch up to 3% between the InAs substrate and InAsSbP wetting layer at T=550°C. Ohmic contacts of the samples were fabricated by the thermal vacuum evaporation technique. The sample's active surface was chosen to be equal to 10^{-2} cm^2. Measurements were performed at gradually increasing magnetic field up to 1.6 T with further decreasing up to zero, which was set to be perpendicular to the surface of quantum dots.

4. Results and discussions

Dependence of magnetoresistance on magnetic field measured at Faraday geometry at 300 K is presented in figure 3(*a*). The dependence of the derivative curve, on which observed effect is more noticeable, is presented in figure 3(*b*). Observed fractures in this curve, possibly are due to the transitions of charge carriers between energy levels due to the influence of magnetic field. As it was shown in [13], the magnetic flux, evidently, leads to a periodic change in the quantum mechanical properties of the encircling electrons. Therefore, under the influence of perpendicular magnetic field, the electron orbits the QD periphery producing an observable MAB, despite the selection rules for transitions in angular momentum, that are strictly valid only for the situation of perfect rotational symmetry and low temperatures.

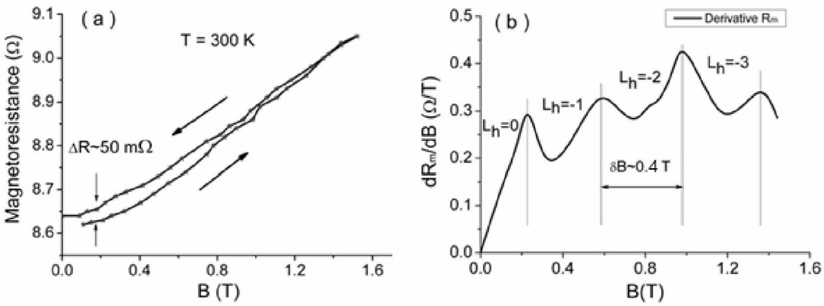


Figure 3. Type-II QDs structure's resistance versus magnetic field at room temperature – (*a*) and its derivative – (*b*).

From figure 3(*b*) also one can see, that the period of oscillations equals to ~0.38 T. Interestingly note that the results of measurements performed at liquid nitrogen temperature show the same value for the period of MAB. This result was expected, because the period of Aharonov-Bohm oscillations is given by following equation:

$$\delta B = \frac{\Delta\Phi}{\Phi_0} = \frac{h}{e\pi ab}, \qquad (4)$$

where h is a Plank constant, e is an elementary charge, a and b are major and minor axles of ellipsoidal quantum dots, respectively, and there is no any temperature dependent parameters. Additionally, AFM measurements show that in our experiments a=1.23b. Using equation (4), dependence of the MAB period on ellipsoidal QDs axles was built, which 3D sketch is presented in figure 4.

Intersection points of a=1.23b line and projection curve of the cross section of 3D graph by $\delta B = const$ planes (figure 5(a)) show sizes of ellipsoidal quantum dots, in which the oscillations are take place at respective value of δB. In figure 5(b) we present intersection point of a=1.23b line and cross section line at $\delta B = 0.37T$ from which we can define average sizes of our quantum dots. On the other hand, for each ellipse we can find corresponding circle with the same surface area. In our case the radii of corresponding circle is equal to 59.7 nm (black curve) and for major and minor semiaxis 66 nm and 54 nm, respectively. At the same time, infinite number of ellipses corresponds to that line.

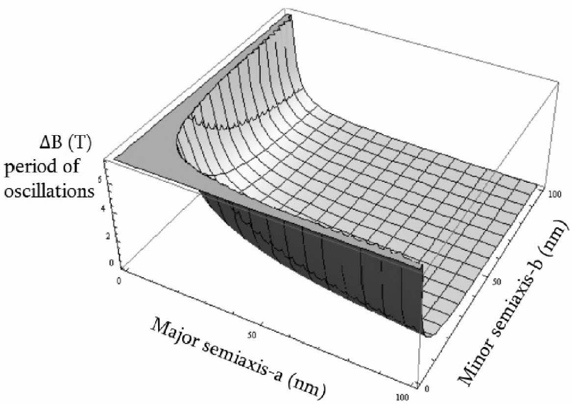


Figure 4. Dependence of MAB oscillations period on ellipsoidal QDs axles.

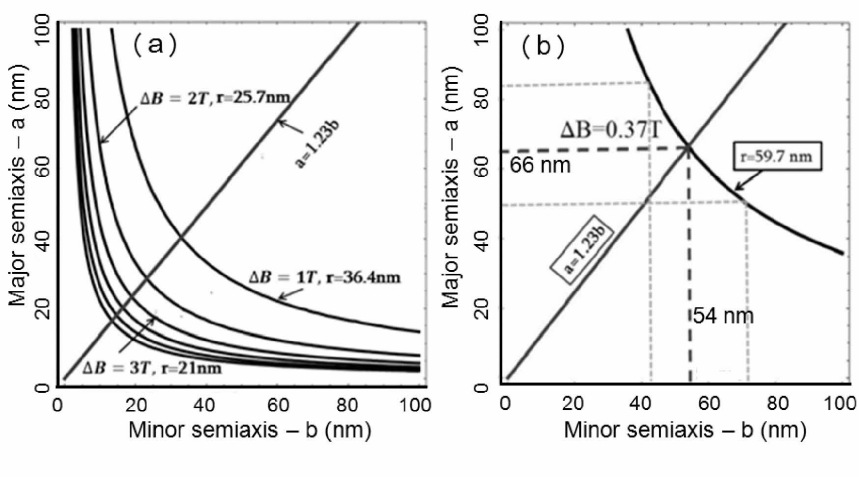


Figure 5. Cross sections of 3D graph by $\delta B = const$ – (a) and $\delta B = 0.37T$ – (b) planes.

Oblique view AFM images of single QDs grown from In-As-Sb-P quaternary liquid phase on InAs(100) substrate are presented in figure 6, from which one can see that the growth process and technological conditions result in an elongation of QDs in certain direction.

Comparing theoretically obtained values for quantum dots' sizes with experimentally measured values, it is not difficult to see, that they are coincide with high accuracy. This fact allows us to precisely define the size of cylindrical quantum dots in which MAB has occurred. As for ellipsoidal quantum dots, we only need to know the relation between values of semiaxes.

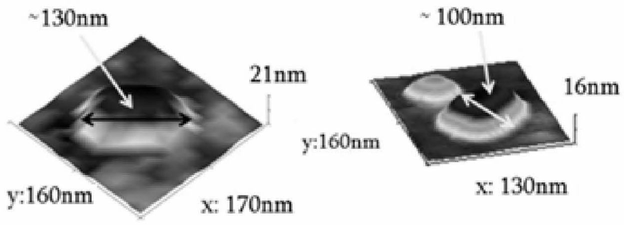


Figure 6. AFM images of QDs grown on InAs(100) substrate.

5. Conclusions

Thus, Aharonov-Bohm oscillations with the period of $\delta B \approx 0.4$ T were found on the curve of the magnetoresistance derivative at room temperature. The average values for both major and minor semiaxes of ellipsoidal QDs were theoretically calculated by the equation for the period of Aharonov-Bohm oscillations. Comparison of calculated and experimentally measured values shows that they are coinciding with high accuracy.

Acknowledgments

This work was performed in the frame of the project № 15T-2J137 funded by the State Committee of Science of Armenia.

References

[1] E. Biolatti, R. Iotti, P. Zanardi, F. Rossi. *Phys. Rev. Lett.*, **85,** 5647-5650 (2000).
[2] F. Troiani, U. Hohenester, E. Molinari. *Phys. Rev. B,* **62,** 2263-2266 (2000).
[3] G. Moody. *Confinement Effects on the Electronic and Optical Properties of Semiconductor Quantum Dots Revealed with Two-Dimensional Coherent Spectroscopy,* 2013 (University of Colorado, USA)
[4] P. Michler, A. Kiraz, C. Becher, W.V, Schoenfeld, P.M. Petroff, L. Zhang, E. Hu, A. Imamoglu. *Science,* **290,** 2282 (2000).
[5] O. Benson, C. Santori, M. Pelton, Y. Yamamoto. *Phys. Rev. Letters,* **84,** 2513 (2000).
[6] C. Santori, D. Fattal, J. Vuckovic, G.S. Solomon, Y. Yamamoto. *Nature,* **419,** 594 (2002).
[7] I. Stranski and L. Krastanow. *Springer,* **71,** 351-364 (1937).
[8] A. Baskaran and P. Smereka. *J. Appl. Phys.,* **111,** 1-6 (2012).
[9] Y. Aharonov and D. Bohm. *The Physical Review,* **115,** 485-491 (1959).
[10] V. Fomin. *Physics of Quantum Rings,* 2014 (Berlin, Springer).
[11] A. Govorov, S. Ulloa, K. Karrai, R. Warburton. *Phys. Rev. B,* **66,** 1-4 (2002).
[12] A. Kalameitsev, A. Govorov, V. Kovalev. *JETP Letters,* **68,** 669-672 (1998).
[13] K.M. Gambaryan, V.G. Harutyunyan, V.M. Aroutiounian, Y. Ai, E. Ashalley, Z.M. Wang. *J. Phys. D: Appl. Phys.,* **48,** 275302 (2015).

CALOGERO MODEL AND ITS GENERALIZATION

T. Hakobyan, A. Nersessian

Yerevan State University, 1 Alex Manoogian Street,
Yerevan, 0025, Armenia

tigran.hakobyan@ysu.am, arnerses@ysu.am

In this proceedings we review the rational Calogero model bound by external oscillator and Coulomb field using the Dunkl operator approach.

1. INTRODUCTION

The rational *Calogero* model is an integrable system of N one-dimensional identical particles interacting with each other by the inverse-square potential. The Hamiltonian has the following form (see [1] for the review):

$$\mathcal{H}_0 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2} + \sum_{i<j} \frac{g(g \mp 1)}{(x_i - x_j)^2}, \qquad g \geq 0. \tag{1.1}$$

An external harmonic oscillator potential does not affect on its integrability [2]:

$$\mathcal{H}_\omega = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2} + \frac{\omega^2 \boldsymbol{x}^2}{2} + \sum_{i<j} \frac{g(g \mp 1)}{(x_i - x_j)^2}, \tag{1.2}$$

were the two vectors describe the momenta and coordinates of the particles with unit mass, $m = 1$,

$$\boldsymbol{p} = (p_1, p_2, \dots, p_N), \qquad \boldsymbol{x} = (x_1, p_2, \dots, x_N).$$

In our units we also set $\hbar = 1$ for the Plank constant. Otherwise, it will change the coupling coefficient by $g(g \mp \hbar)$. The particles are supposed to be identical, and the minus sign in the hamiltonian (1.2) is chosen for bosons while the plus is applied for fermions.

We refer to the system (1.2) as the *Calogero-oscillator* model. Actually, in the literature this system is referred to as the Calogero model, while the unbound system $\mathcal{H}_0$ is referred as the Calogero-Moser system due to Moser who established the Liouville integrability [3]. Our notations are more proper for reflecting the structure of underlying models.

The *Calogero-Coulomb* system is defined in the same way by including the Calogero interaction potential into the N-dimensional Coulomb system with $1/r$ potential [4],

$$\mathcal{H}_\gamma = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2} - \frac{\gamma}{r} + \sum_{i<j} \frac{g(g \mp 1)}{(x_i - x_j)^2}, \qquad r = \sqrt{\boldsymbol{x}^2}. \tag{1.3}$$

Apart from the above two models, it has no clear interpretation as a N-particle system since the Coulomb potential mixes the coordinates of different particles in a strange way. Alternatively, one can consider the Hamiltonian $\mathcal{H}_\gamma$ as a single N-dimensional Coulomb particle in the field formed by the Calogero potential.

The three systems $\mathcal{H}_0$, $\mathcal{H}_\omega$ and $\mathcal{H}_\gamma$ are superintegrable [5–7] like their $g = 0$ analogs without the Calogero potential. The superintegrability means that apart from the N (commutative) Liouville integrals they have additional $N - 1$ integrals.

In this proceedings we well shortly review the Calogero, Calogero-oscillatir and Calogero-Coulomb systems pointing out especially on their analogy, respectively, with the free-particle, oscillator and Coulomb systems. In short, the Calogero interaction potential does not change drastically the common properties of these well-known systems. To archive this goal, we will use the Dunkl operator approach [8], which hides the Calogero potential into the derivative providing a structure similar to the covariant derivative.

2. CALOGERO-OSCILLATOR SYSTEM

The similarity between the Calogero model and a free particle, as well as between the Calogero-oscillator model and an oscillator, is clearly elucidated from the perspective of the matrix model reduction and the exchange operator formalism (see [1] for the review). Let us briefly outline the second approach, elaborated independently by Polychronakos [9] and by Brink, Hansson, and Vasiliev [10], which then has been found to be related with seminal work by Dunkl [8]. Following these authors, we can take into account the Calogero interaction, replacing the momenta $p_i = -\imath\partial_i$ by the deformed momenta

$$\pi_i = -\imath\nabla_i, \tag{2.1}$$

defined in terms of the Dunkl operators

$$\nabla_i = \partial_i - \sum_{j\neq i} \frac{g}{x_i - x_j} s_{ij}. \tag{2.2}$$

Here s_{ij} is the exchange operator between the ith and jth coordinates:

$$s_{ij}\psi(\ldots, x_i, \ldots, x_j, \ldots) = \psi(\ldots, x_j, \ldots, x_i, \ldots). \tag{2.3}$$

Amazingly, such operators commute like usual partial derivatives:

$$[\nabla_i, \nabla_j] = 0. \tag{2.4}$$

Meanwhile, their commutations with the coordinates are more involved and expressed through the permutations:

$$[\nabla_i, x_j] = S_{ij} = \begin{cases} -g s_{ij} & \text{for } i \neq j, \\ 1 + g\sum_{k\neq i} s_{ik} & \text{for } i = j. \end{cases} \tag{2.5}$$

In the absence of the inverse-square potential ($g = 0$), the above relations define the usual Heisenberg algebra.

The Calogero-oscillator Hamiltonian (1.2) can be obtained by the restriction of the generalized Hamiltonian

$$\mathcal{H}_\omega^{\text{gen}} = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2} + \frac{\omega^2\boldsymbol{x}^2}{2} \tag{2.6}$$

to the symmetric wavefunctions [10]:

$$s_{ij}\psi_s(x) = \psi_s(x). \tag{2.7}$$

In these terms there is a remarkable similarity between the the Calogero-oscillator and ordinary oscillator systems. To show this correspondence, let us introduce an analog of spectrum generated operators,

$$a_i^{\pm} = \frac{x_i \mp \nabla_i}{\sqrt{2}}, \tag{2.8}$$

where, for simplicity, we set $\omega = 1$ here and in the following. It is easy to see that they obey the same commutation rule as Dunkl operators and coordinates:

$$[a_i, a_j^+] = S_{ij}, \qquad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0. \tag{2.9}$$

Then the generalized Calogero model in harmonic potential potential is expressed via the introduced operators like in the absence of the Calogero potential, $g = 0$ when the system is reduced to the usual oscillator model [9, 10],

$$\mathcal{H}_\omega^{\text{gen}} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}(a_i^+ a_i + a_i a_i^+) = \sum_{i=1}^{N} a_i^+ a_i + \frac{N}{2} - S. \tag{2.10}$$

In the derivation of the second equation we have used the commutation rule (2.9) with the notation

$$S = \sum_{i<j} S_{ij}. \tag{2.11}$$

Note that this element commuted with all permutations,

$$[s_{ij}, S] = 0. \tag{2.12}$$

The restriction of the Hamiltonian to bosonic (fermionic) wave functions where the pair exchange take the values ± 1, is given by the expression

$$\mathcal{H}_\omega = \sum_{i=1}^{N} a_i^+ a_i + E_0^\pm$$

with the ground state energy

$$E_0^\pm = \frac{N}{2} \pm \frac{gN(N-1)}{2}. \tag{2.13}$$

The plus stands for the bosonic wave function while the minus is for the fermions,

$$s_{ij}\psi_\pm(\boldsymbol{x}) = \pm\psi_\pm(\boldsymbol{x}). \tag{2.14}$$

The analogy with oscillator goes further if we look at the commutation rules of these operators with the Hamiltonian

$$[\mathcal{H}_\omega^{\text{gen}}, a_i^\pm] = \pm a_i^\pm. \tag{2.15}$$

The bosonic ground state wave function $\psi_0 = \psi_{0+}$ with the ground state energy E_0^+ must be annihilated under the action of all lowering operators [10],

$$a_i\psi_0(\boldsymbol{x}) = 0 \qquad \text{or} \qquad \frac{\partial_i\psi_0(\boldsymbol{x})}{\psi_0(\boldsymbol{x})} = -x_i + \sum_{j\neq i}\frac{g}{x_i - x_j}.$$

Using the logarithmic derivative, the solution can be easily found,

$$\psi_0(\boldsymbol{x}) = \prod_{i<j}|x_i - x_j|^g \exp\left(-\tfrac{1}{2}\boldsymbol{x}^2\right).$$

Similarly to the isotropic oscillator case, the excited states are generated by the rising operators acting on the ground state. So, up to a normalisation factor, they are

$$\psi_{n_1\ldots n_N}(\boldsymbol{x}) = (a_1^+)^{n_1}(a_2^+)^{n_2}\ldots(a_N^+)^{n_N}\psi_0(\boldsymbol{x}), \tag{2.16}$$

where n_i are nonnegative integer numbers, $n_i \geq 0$. Using the relation (2.15), it can be checked that these wave functions are eigenstates of the nonlocal Hamiltinian

$$\mathcal{H}_\omega^{\text{gen}}\psi_{n_1\ldots n_N} = E_{n_1\ldots n_N}\psi_{n_1\ldots n_N}, \qquad E_{n_1\ldots n_N} = E_0 + \frac{N}{2} + \sum_{i=1}^{N} n_i. \tag{2.17}$$

In order to construct the excitations of the local Calogero-oscillator Hamiltonian, we must restrict ourself to the symmetric wave functions and hence symmetrized rising-lowering operators

$$B_l^\pm = \sum_{i=1}^{N}(a_i^\pm)^l. \tag{2.18}$$

Then the excitations are described by the states [11]

$$|k_1,\ldots,k_N\rangle = (B_1^+)^{k_1}(B_2^+)^{k_2}\ldots(B_N^+)^{k_N}\psi_0(\boldsymbol{x}) \tag{2.19}$$

with being again some nonnegative integers, $k_i = 0, 1, 2\ldots.$ Taking into account the fact that the operator B_l rises the spectrum level on the value l due to the relation

$$[\mathcal{H}_\omega, B_l^+] = [\mathcal{H}_\omega^{\text{gen}}, B_l^+] = \pm l B_l^+, \tag{2.20}$$

we immediately get the explicit spectrum for the Calogero-oscillator Hamiltonian with the bosons

$$E_{k_1\ldots k_N} - E_0 + k_1 + 2k_2 + \cdots + Nk_N.$$

The Liouville integrals of motion of the unbound nonlocal Calogeo model $\mathcal{H}_0^{\rm gen}$ are just the commuting Dunkl momenta. For the local Hamiltonian $\mathcal{H}_0$ they must be symmetrised in order to act correctly on the bosonic or fermionic wave functions [1],

$$I_k = \sum_i \pi_i^k, \qquad k = 1, 2, \ldots, N. \tag{2.21}$$

For the Calogero system bound by the oscillator potential $\mathcal{H}_\omega$ they are given by [9]

$$I_k = \sum_i (a_i^+ a_i)^k. \tag{2.22}$$

Apart from the Liouville integrals, these models possess additional $N-1$ integrals of motion. Such systems are called superintegrable. Such additional constants can be described using the deformed angular momentum operator. Define the Dunkl angular momentum tensor by substituting the Dunkl momentum in place of the usual momentum [12, 13]:

$$L_{ij} = x_i\pi_j - x_j\pi_i : \tag{2.23}$$

Using the commutation relations between coordinated and Dunkl momentum, it is easy to show that the deformed momentum are integrals for generalised Calogero and Calogero-oscillator Hamiltonians, which are distinct from the Liouville ones:

$$[L_{ij}, \mathcal{H}_0^{\rm gen}] = [L_{ij}, \mathcal{H}_\omega^{\rm gen}] = 0.$$

The commutator between L_{ij} are deformations of usual $so(N)$ angular momentum computational rule

$$[L_{ij}, L_{kl}] = -\imath L_{il}S_{jk} - \imath L_{jk}S_{il} + \imath L_{ik}S_{lj} + \imath L_{jl}S_{ik}.$$

The constants of motion of the Calogero-oscillator model $\mathcal{H}_\omega$ can be associated with the symmetric polynomials ensuring their valid action on the wave functions (2.7). 13

$$\mathcal{L}_{2k} = \sum_{i<j} L_{ij}^{2k}. \tag{2.24}$$

3. CALOGERO-COULOMB SYSTEM AND OTHER EXTENSIONS

Define generalized Calogero-Coulomb Hamiltonian in terms of Dunkl operators [6]:

$$\mathcal{H}_\gamma^{\rm gen} = \frac{\boldsymbol{\pi}^2}{2} - \frac{\gamma}{r}. \tag{3.1}$$

After the reduction to the bosonic or fermionic states it reduced to the Calogero-Coulomb model (1.3), first introduced by Khare [ ], The last system is maximally superintegrable [6, 7]. The nonlocal Hamiltonian preserves the Dunkl angular momentum and Runge-Lenz vector:

$$[\mathcal{H}_\gamma^{\rm gen}, L_{ij}] = 0, \qquad [\mathcal{H}_\gamma^{\rm gen}, A_i] = 0. \tag{3.2}$$

Here the deformed expression for the Runge-Lenz vector has the following form [7]:

$$A_i = \frac{1}{2}\sum_j \{L_{ij}, \pi_j\} - \frac{\gamma x_i}{r} + \frac{\imath}{2}[\pi_i, S], \tag{3.3}$$

where the permutation-invariant element S is defined in equation (2.11). It vanished at the $g = 0$ point so that the expression of A_i reduces to the standard N-dimensional Runge-Lenz vector in this case. The deformed angular momentum and Runge-Lenz vector form with the Hamiltonian a quadratic algebra,

$$[A_i, L_{kl}] = \imath A_k S_{li} - \imath A_l S_{ki}, \qquad [A_i, A_j] = -2\imath\mathcal{H}_\gamma^{\rm gen} L_{ij}. \tag{3.4}$$

The integrals of motion for the local Calogero-Coulomb model (1.3) are obtained by taking symetric polynomials on L_{ij} (2.24) and A_k,

$$\mathcal{A}_k = \sum_i A_i^k.$$

These invariants produce $2N-1$ independent set of integrals for the Calogero-Coulomb system ensuring its maximal superintegrability.

So far, the Calogero, Calogero-oscillator and Calogero-Coulomb systems are defined on the flat Euclidean space. These systems have been extended also to the surfaces with constant curvature: N-dimensional sphere and hyperboloid [6, 14]. The matter id that the Dunkl operator provides an appropriate deformation of the Laplace-Beltrami operator on sphere which incorporates the Calogero interaction terms [14]. The algebra of constants of motion for nonlocal Hamiltonians acquire now the additional deformation parameter related to the curvature. The superintegrability property is preserved.

---

[1] A. P. Polychronakos, *Physics and mathematics of Calogero particles*, J. Phys. A **39** (2006) 12793, hep-th/0607033.

[2] F. Calogero, *Solution of a three-body problem in one dimension*, J. Math. Phys. **10** (1969) 2191; *Solution of the one-dimensional N-body problems with quadratic and/or inversely quadratic pair potentials*, *ibid.* **12** (1971) 419.

[3] J. Moser, *Three integrable hamiltonian systems connected with isospectral deformations*, J. Moser, Adv. Math. **16** (1975) 197.

[4] A. Khare, *Exact solution of an N-body problem in one dimension*; P. K. Ghosh and A. Khare, *Relationship between the energy egenstates of Calogero-Sutherland models with oscillator and Coulomb-like potentials*, J. Phys. A **32** (1999) 2129, solv-int/9808005.

[5] S. Wojciechowski, *Superintegrability of the Calogero-Moser system*, Phys. Lett. A **95** (1983) 279; V.B. Kuznetsov, *Hidden symmetry of the quantum Calogero-Moser system*, Phys. Lett. A **218** (1996) 212, solv-int/9509001; C. Gonera, *A note on superintegrability of the quantum Calogero* , Phys. Lett. A **237** (1998) 365.

[6] T. Hakobyan, O. Lechtenfeld, and A. Nersessian, *Superintegrability of generalized Calogero models with oscillator or Coulomb potential*, Phys. Rev. D **90** (2014) 101701(R), arXiv:1409.8288.

[7] T. Hakobyan and A. Nersessian, *Runge-Lenz vector in the Calogero-Coulomb problem*, Phys. Rev. A **92** (2015) .022111, arXiv:1504.00760.

[8] C. F. Dunkl, *Differential-difference operators associated to reflection groups*, Trans. Amer. Math. Soc. **311** (1989) 167.

[9] A. Polychronakos, *Exchange operator formalism for integrable systems of particles*, Phys. Rev. Lett. **69** (1992) 703, hep-th/9202057.

[10] L. Brink, T. Hansson, and M. Vasiliev, *Explicit solution to the N-body Calogero problem*, Phys. Lett. B **286** (1992) 109, hep-th/9206049.

[11] M. Feigin, O. Lechtenfeld, and A. Polychronakos, *The quantum angular Calogero-Moser model*, JHEP **1307** (2013) 162, arXiv:1305.5841.

[12] M. Feigin, *Intertwining relations for the spherical parts of generalized calogero operators*, Theor. Math. Phys. **135** (2003) 497.

[13] M. Feigin and T. Hakobyan, *On the algebra of Dunkl angular momentum operators*, arXiv:1409.2480.

[14] F. Correa, T. Hakobyan, O. Lechtenfeld, and A. Nersessian, *Spherical Calogero model with oscillator/Coulomb potential: Quantum case*, Phys. Rev. D **93** (2016) 125009, arXiv:1604.00027.

УДК 538.915, 537.6

ОДНОЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В КВАНТОВОМ КОЛЬЦЕ НА СФЕРЕ В ПОЛЕ ДИРАКОВСКОГО МОНОПОЛЯ

В. Шахназарян[1,2,3]

[1] Университет Исландии
[2] Российско-Армянский университет
[3] Университет ИТМО

vanikshahnazaryan@gmail.com

АННОТАЦИЯ

В данной статье рассматривается квантомеханическая задача одночастичных состояний в квантовом кольце в сферическом нанослое в присутствии поля дираковского монополя. В качестве ограничивающих потенциалов в радиальном и полярном направлениях выбраны прямоугольные ямы с непроницаемыми стенками. В рамках данной модели найдены аналитические выражения для волновых функции и энергетического спектра. Исследована зависимость энергии электрона от размеров кольца и заряда магнитного монополя.

Ключевые слова: квантовое кольцо, сферический нанослой, монополь Дирака.

Введение

Теоретическое исследование электронных состояний в слоистых наноструктурах берет начало с пионерских работ Чакраборти и Пителайнена [1–3]. Авторы рассмотрели одноэлектронные и многоэлектронные состояния в квантовых кольцах. Были исследованы влияние примесей, а также внешнего магнитного поля. Для описания движения

электрона внутри кольца, с учетом ограничения движения как на внешнем, так и на внутреннем радиусах кольца авторами была предложена модель ограничивающего потенциала в форме $V_{conf}(r) = \kappa(r - r_0)^2$, где κ характеризует интенсивность локализации электрона.

Помимо слоистых структур цилиндрической формы были рассмотрены также сферические нанослои [4–6]. Можно утверждать, что разность между уровнями энергии в радиальном направлении тем больше, чем уже рассматриваемый слой [7]. В этой ситуации мы можем сказать, что каждый уровень радиального квантования соответствует семейству вращательных уровней. Это означает, что при относительно низких энергиях можно предположить, что электрон находится в основном состоянии радиального направления. Прямой расчет показывает, что электрон локализован в центре квантового слоя. Таким образом, в случае кольцеобразной слоистой структуры малой толщины задача сводится к задаче двумерного ротатора, а в случае сферического квантового слоя приходим к задаче сферического ротатора [8].

В приведенных выше работах частица двигалась по всей поверхности сферы. Однако интересная ситуация возникает, когда движение электрона ограничивается и в полярном направлении. Одноэлектронные и двухэлектронные состояния, а также оптические свойства таких структур, названных квантовыми кольцами на сферической поверхности, были исследованы в работах [9–11]. В качестве ограничивающего потенциала в полярном направлении выбирались модель прямоугольной ямы с непроницаемыми стенками и так называемый комплексно-проектируемый сингулярный осциллятор, предложенный Белуччи и Нерсисяном [12]. Симметрия рассматриваемой структуры и выбранных потенциалов позволяет найти аналитические решения одноэлектронного уравнения Шредингера и при наличии в центре структуры монополя Дирака [13, 14]. Последняя, помимо добавки векторно-

го потенциала в кинетический оператор Гамильтониана, также добавляет центростремительный член в потенциальную энергию

$$U(r,\theta)\to U(r,\theta)+\frac{\hbar^2 s^2}{2\mu r^2}, \qquad (1)$$

где $s=0,\pm 1/2,\pm 1,\pm 3/2,...$

Целью данной работы является исследование влияния монополя Дирака, помещенного в центр сферического нанослоя, на электронные состояния системы.

Теория

Рассмотрим задачу квантового кольца на сферической поверхности в присутствии дираковского монополя, потенциал которого задается выражением (1). В сферических координатах стационарное уравнение Шредингера для такой системы запишется следующим образом:

$$\frac{1}{2\mu}\left(\vec{p}-\frac{e}{c}\vec{A}\right)^2\psi+\left[V_{conf}^{rad}(r)+V_{conf}^{ang}(r,\theta)+\frac{\hbar^2 s^2}{2\mu r^2}\right]\psi=E\psi, \qquad (2)$$

где $\vec{A}$ есть вектор потенциал монополя:

$$\vec{A}=\frac{\hbar cs}{2e}\frac{1}{r(r+z)}\{-y,x,0\}, \qquad (3)$$

$\mu(e)$ – эффективная масса (заряд) электрона, c обозначает скорость света. Радиальный ограничивающий потенциал выбран в виде прямоугольной непроницаемой ямы

$$V_{conf}^{rad}(r)=\begin{cases}0, & \mathrm{R}_1<\mathrm{r}<\mathrm{R}_2,\\ \infty, & \mathrm{r}<\mathrm{R}_1,\quad \mathrm{r}>\mathrm{R}_2,\end{cases} \qquad (4)$$

где R_1 и R_2 являются внутренним и внешним радиусом слоя. Считая толщину слоя очень малой, можно факторизовать волновую фунцкию

в виде $\psi(r,\theta,\varphi)=R_0(r)\chi(\theta,\varphi)$, где $R_0(r)$ есть собственная фунцкия основного состояния радиального уравнения

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(\frac{d^2}{dr^2}+\frac{2}{r}\frac{d}{dr}\right)R(r)+V_{conf}^{rad}(r)R(r)=E^{rad}R(r), \qquad (5)$$

где $E^{rad}=\pi^2\hbar^2N^2/2\mu(R_1-R_2)^2$, $N=1,2,3,\ldots$. В явном виде радиальная волновая фунцкия записывается как $R_0(r)=\sqrt{\frac{\pi\lambda}{2r}}\left[D_{1\frac{1}{2}}(\lambda r)+D_2J_{-\frac{1}{2}}(\lambda r)\right]$, где $\lambda=\sqrt{2\mu E_0^{rad}/\hbar^2}$, $J_\upsilon(x)$ фунцкия Бесселя первого рода, D_1, D_2 – нормировочные константы. Таким образом, задача свелась к эффективно двумерному движению электрона по поверхности сферы с радиусом.

До того, как приступить к анализу угловой задачи, необходимо конкретизировать вид углового ограничивающего потенциала. В данной работе рассмотрен случай углового ограничения в виде прямоугольной ямы с непроницаемыми стенками:

$$V_{conf}^{ang}(\theta)=\begin{cases}0, & \theta_1<\mathrm{r}<\theta_2,\\ \infty, & \theta<\theta_1,\ \ \theta>\theta_2,\end{cases} \qquad (6)$$

где θ_1, θ_2 есть граничные углы в полярном направлении. Однако следует отметить, что задача имеет аналитическое решение и в случае углового ограничивающего потенциала, заданного в форме комплексно-проектируемого N-мерного (CP^N) осциллятора [15].

Внутри области ограничения угловая часть уравнения Шредингера запишется как:

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\theta^2}+\cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}-\frac{2}{1+\cos\theta}\left(s^2-is\frac{\partial}{\partial\varphi}\right)\right]f(\theta,\varphi)= \\ =-\frac{2\mu r_{eff}^2}{\hbar^2}\left(E-E_0^{rad}\right)f(\theta,\varphi). \qquad (7)$$

Подставляя решение в виде $f(\theta,\varphi)=P(\theta)\exp(im\varphi)$ и введя обозначения $m+2s=\lambda$, $\frac{2\mu r_{eff}^2}{\hbar^2}\left(E-E_0^{rad}\right)=l(l+1)$, приходим к уравнению типа Пешля-Теллера:

$$\frac{d^2P}{d\theta^2}+\cot\theta\frac{dP}{d\theta}+\left[l(l+1)-\frac{m^2}{2(\cos\theta-1)}-\frac{\lambda^2}{2(\cos\theta+1)}\right]P(\theta)=0. \qquad (8)$$

Решение уравнение (8) имеет форму $P(\theta)=C_1P_1(\theta)+C_2P_2(\theta)$, где

$$\begin{cases} m\geq 0, \quad P_1(\theta)=\sin^m\frac{\theta}{2}\cos^\lambda\frac{\theta}{2}\,{}_2F_1\left(\frac{m+\lambda}{2}+l+1,\frac{m+\lambda}{2}-l,1+m,\sin^2\frac{\theta}{2}\right), \\ m<0, \quad P_1(\theta)=\sin^{-m}\frac{\theta}{2}\cos^\lambda\frac{\theta}{2}\,{}_2F_1\left(\frac{\lambda-m}{2}+l+1,\frac{\lambda-m}{2}-l,1-m,\sin^2\frac{\theta}{2}\right), \end{cases} \qquad (9)$$

и

$$\begin{cases} 1+\lambda\neq 0,-1,-2,..., \quad P_2(\theta)= \\ =\sin^m\frac{\theta}{2}\cos^\lambda\frac{\theta}{2}\,{}_2F_1\left(\frac{m+\lambda}{2}+l+1,\frac{m+\lambda}{2}-l,1+\lambda,\cos^2\frac{\theta}{2}\right), \\ 1+\lambda=0,-1,-2,..., \quad P_2(\theta)= \\ =\sin^m\frac{\theta}{2}\cos^{-\lambda}\frac{\theta}{2}\,{}_2F_1\left(\frac{m-\lambda}{2}+l+1,\frac{m-\lambda}{2}-l,1-\lambda,\cos^2\frac{\theta}{2}\right). \end{cases} \qquad (10)$$

Энергетический спектр находится из выполнения граничных условий

$$\begin{Vmatrix} P_1(\theta_1) & P_2(\theta_1) \\ P_1(\theta_2) & P_2(\theta_2) \end{Vmatrix}=0. \qquad (11)$$

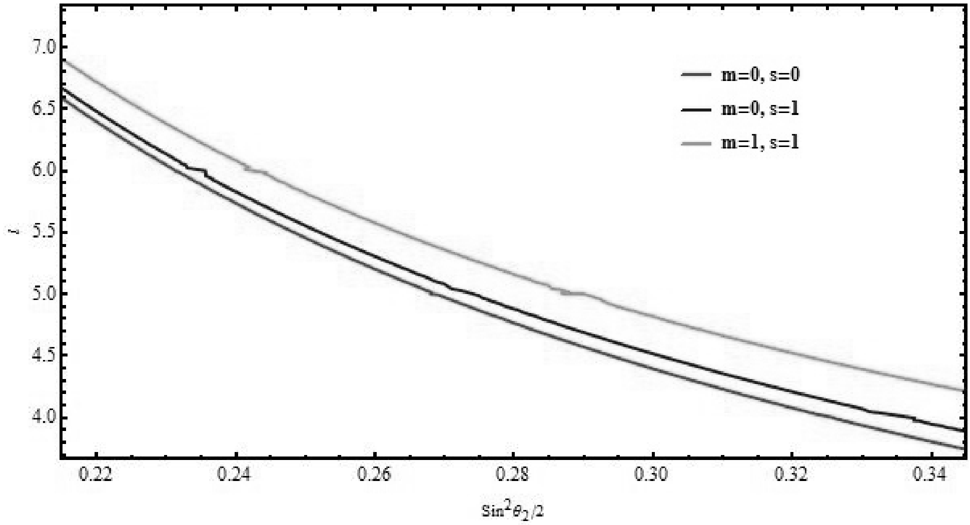


Рис. 1. Зависимость квантового числа l от угла ограничения.

Для нахождения энергетического спектра необходимо решить уравнение (11) численно. Интересно отметить, что решение при выборе подобного рода потенциала ограничения имеет универсальный характер и совершенно не зависит от конкретного типа материалов. На рисунке 1 показана зависимость квантового числа l, характеризующего энергию углового движения от значения ограничивающего угла θ_2 при различных значениях магнитного квантового числа m и заряда монополя s. Следует отметить, что, в отличие от задач со сферической симметрией, в случае кольцевой симметрии l более не принимает целочисленные значения [11]. Уменьшение значения l с ростом угла объясняется увеличением объема квантования, которая приводит к уменьшению энергии электронных состояний.

На Рис. 2 показана зависимость l от магнитного заряда s при различных значений магнитного квантового числа. При этом, будем считать граничные углы зафиксированными и равными $\theta_1 = \dfrac{\pi}{6}$,

$\theta_2 = \dfrac{\pi}{3}$. Результаты показаны для нижнего энергетического состояния. Сплошные линии приведены для лучшей видимости. Как следует из рисунка, энергия растет с увеличением числа заряда монополя. Однако при ненулевых значениях магнитного квантового числа минимум сдвигается (см. рисунок). Также следует отметить, что при фиксированном значении модуля заряда монополя энергия вырождена по отношению магнитного квантового числа m.

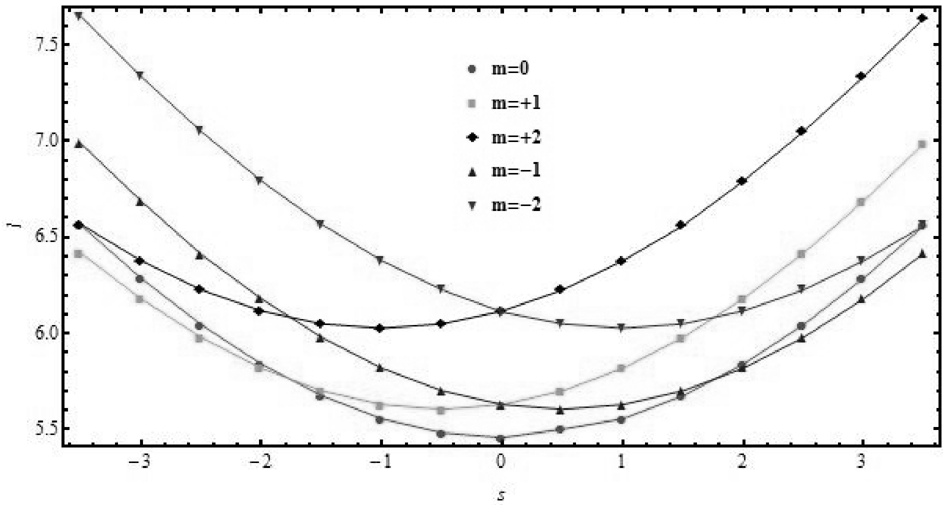


Рисунок 2. Зависимость квантового числа l от заряда дираковского монополя.

Заключение

Резюмируя, рассмотрена задача одночастичных состояний в квантовом кольце в сферическом нанослое в присутствии поля дираковского монополя. В качестве ограничивающих потенциалов в радиальном и полярном направлениях выбраны прямоугольные ямы с непроницаемыми стенками. В рамках выбранной модели найдены аналитические выражения для энергетического спектра и волновых функ-

ций. Последние выражаются посредством гипергеометрических функций. Исследована зависимость энергии электронных состояний от размеров кольца и заряда магнитного монополя.

Благодарность

Автор выражает благодарность профессорам А. Саркисяну и А. Нерсесяну за ценные дискуссии.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Chakraborty T., Pietilainen P.* Interacting-electron states and the persistent current in a quantum ring. Solid State Commun. **87**, 809 (1993).
2. *Chakraborty T., Pietilainen P.* Electron-electron interaction and the persistent current in a quantum ring. Phys. Rev. B **50**, 8460 (1994).
3. *Halonen V., Pietilainen P., Chakraborty T.* Optical-absorption spectra of quantum dots and rings with a repulsive scattering centre. Europhys. Lett. **33**, 377 (1996).
4. *Tkach N.V., Holovatsky V.A., Voitsekhivska O.N.* On the spectra of electrons and holes in an open spherical nanoheterostructure (through the example of GaAs/AlxGa1−xAs/GaAs). Semiconductors **34**, 583–588 (2000).
5. *Aghekyan N.G., Kazaryan E.M, Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A.,* Two electronic states in spherical quantum nanolayer, Proceedings of SPIE 7998, 79981C-79981C-9 (2010).
6. *Aghekyan N.G., Kazaryan E.M., Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A.* Two electronic states and state exchange time control in spherical nanolayer, Superlattices and Microstructures **50**, 199–206 (2011).

7. *Aghekyan N., Kazaryan E., Sarkisyan H.* Two electron states in a thin spherical nanolayer: reduction to the model of two electrons on a sphere, *Few-Body Systems* **53**, 505 (2012).
8. *Kazaryan E.M., Kostanyan A.A., Sarkisyan H.A.* Interband transitions in a spherical quantum layer in the presence of an electric field: spherical rotator model, J. Contemp. Phys. Armen. Acad. Sci. **42**, 145 (2007).
9. *Kazaryan E., Shahnazaryan V., Sarkisyan H.* Quantum ring on sphere: Electron states on spherical segment", Physica E **52**, 122–126 (2013).
10. *Kazaryan E., Shahnazaryan V., Sarkisyan H.* Two electron states in a quantum ring on a sphere, Few Body Systems **55**, 151–158 (2014).
11. *Kazaryan E., Shahnazaryan V., Sarkisyan H.* Optical interband absorption and Stark shift in a quantum ring on a sphere, Optics Communications **315**, 253–257 (2014).
12. *Bellucci S., Nersessian A.* (Super) oscillator on CPN and a constant magnetic field, Physical Review *D* **67**, 5013 (2003).
13. *Aramyan K.* Integrable model of a two-dimensional singular spherical oscillator in a constant magnetic field, Theoretical and Mathematical Physics **156**, 1075 (2008).
14. *Ray M.W., Ruokokoski E., Kandel S., Möttönen M., Hall D.S.* Observation of Dirac monopoles in a synthetic magnetic field, Nature **505**, 657–660 (2014).

ONE ELECTRON STATES IN QUANTUM RING ON A SPHERE IN A PRESENCE OF THE DIRAC MONOPOLE

V. Shahnazaryan[1,2,3]

[1] University of Iceland
[2] Russian-Armenian University
[3] Armenian National Polytechnical University
vanikshahnazaryan@gmail.com

ABSTRACT

We discuss the problem of one electronic states in quantum ring in a spherical nanolayer in the presence of Dirac monopole. The confinement potential in radial and polar directions is chosen in the form of rectangular impenetrable walls. In the framework of the model analytic expressions for wave function and energy spectrum are found. We study the dependence of electron energy on the geometrical parameters of quantum ring and monopole charge.

Keywords: quantum ring, spherical nanolayer, Dirac monopole.

ՄԵԿԷԼԵԿՏՐՈՆԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐ ՍՖԵՐԻԿ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ՕՂԱԿՈՒՄ ԴԻՐԱԿԻ ՄՈՆՈՊՈԼԻ ԴԱՇՏԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՄԲ

Վ. Շահնազարյան[1,2,3]

[1] Իսլանդիայի համալսարան
[2] Հայ-Ռուսական համալսարան
[3] ԻՏՄՕ համալսարան
vanikshahnazaryan@gmail.com

ԱՄՓՈՓՈՒՄ

Դիտարկված է մեկէլեկտրոնային վիճակների քվանտոմեխանիկական խնդիրը սֆերիկ քվանտային օղակում դիրակյան մոնոպոլի առկայությամբ: Ռադիալ և բևեռային ուղղություններով սահմանափակող պո-

տենցիալը ընտրված է ուղղանկյունաձև անթափանց պատերով քվանտային փոսի տեսքով: Ընտրված մոդելի շրջանակներում ստացված են անալիտիկ արտահայտություններ ալիքային ֆունկցիայի և էներգետիկ սպեկտրի համար: Հետազոտված է էլեկրոնային վիճակների էներգիաների կախումը քվանտային թղակի չափերից և մոնոպոլի լիցքից: Հետազոտված է մոնոպոլի առկայության ազդեցությունը միջգոտիական օպտիկական անցումների վրա:

Հիմնաբառեր՝ քվանտային օղակ, սֆերիկ նանոշերտ, Դիրակի մոնոպոլ:

COULOMB INTERACTION IN THE FINITE DIELECTRIC-ENVIRONMENT MEDIATED MOSFET STRUCTURES

K.H. Aharonyan [a, c,*]***, E.M. Kazaryan*** [b]***, E.P. Kokanyan*** [c]

[a] National Polytechnic University of Armenia,
Yerevan, 105 Teryan Street, Yerevan 375009, Armenia
[b] Russian-Armenian State University, 123 Hovseph Emin Street, Yerevan 375051,
[c] ArmeniaArmenian State Pedagogical University ,
13 Khandjyan Street,Yerevan 375010, Armenia

ABSTRACT

A formalism for studying the inversion channel region Coulomb interaction properties in field effect transistor (FET) structure in account of inhomogeneous and finite dielectric background is introduced. For that interaction potential $\varphi(\rho, z)$ expression in a four-layer FET structure is obtained in the first time. Analytical study of $\varphi(\rho, z)$ in a three-layer FET structure is delivered as well. As received, $\varphi(\rho, z)$ is enhanced twice in relation to semiconductor/dielectric two- and three- layer dielectrically homogeneous system cases.

Keywords: inversion channel, finite dielectric layer, interaction potential, FET structure.

1.Introduction

The metal–oxide–semiconductor field-effect transistors (MOSFETs) for more than four decades have been scaled on silicon (Si) mainly due to its thermal SiO_2 oxide proper gate dielectric properties. As nowadays

* *Corresponding author's E-mail: ahkamo@yahoo.com*

MOSFETs scaling is reaching its physical and optimal limits since devices have been getting smaller, the scaling down into sub-nanometer equivalent oxide thickness range by dielectric layer with high dielectric constant value (high – κ dielectric) is of critical importance [1]. Thus that it is exactly reasonable to replace the SiO_2 by a gate high – κ dielectric in which case already Si loses some of its domination and alternative semiconductor environment could be used as the MOSFET high mobility channel.

Many materials such as III-V key semiconductors, few-layer graphene and metal dichalcogenides have been raised a consideration for ultra-low power, high-speed MOSFET application as well as innovative structures due to their high electron (hole) mobility properties as compared to Si. For those applications, the deposition of high - k gate dielectric on aforementioned materials with good interface quality that enhance the gate oxide–semiconductor interface thermodynamically is very important for the effective performance of devices. At present it is technically realistic to replace the SiO_2 by a gate dielectrics with a much higher dielectric constant such as HfO_2, ZrO_2 or La_2O_3 in the surface-channel inversion-mode III–V MOSFETs with atomic layer deposition [2, 3].

Despite the progress both in the fabrication and in component materials unusual combination choice, all MOSFET systems for their functioning demonstrate common feature is that it requires one or several finite thickness dielectric layer media exhibiting important polarization effects due to the difference between dielectric constants of the channel and barriers regions [4]. As result, the spatial proximity of the metal gate and finite thickness dielectric environment would reasonably modify the interaction potential in inversion channel region in comparison with the host semiconductor environment itself.

Calculation of inversion channel region Coulomb interaction properties in MOSFET structure in account of inhomogeneous and finite dielectric background is the main aim of this paper.

2.Coulomb interaction properties in a four-layer MOSFET structure

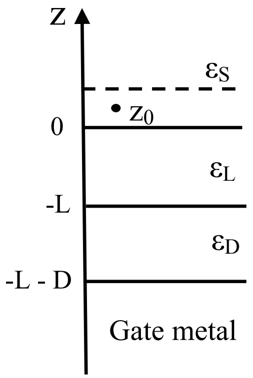


Fig. 1. Four layer FET system

We discuss a four-layer heterogeneous structure in which region $z \le -(L+D)$ is occupied by a gate metal, region $-(L+D) < z \le -L$ by a dielectric with dielectric constant ε_D of thickness *D*, region $-L < z \le 0$ by an intermediate dielectric layer with dielectric constant ε_L of thickness *L* and region $0 < z \le \infty$ by a semiconductor substrate with dielectric constant ε_S as shown in Fig. 1. The z axis is perpendicular to the interfaces. The point charge *e* at the site with coordinates $\rho = 0$, $z = z_0$ (ρ - is two-dimensional (2D) plane coordinate) placed in the oxide/semiconductor junction region with 2D inversion layer.

Let consider the Coulomb interaction issues in such MOSFET structure. The Coulomb interaction potential $\varphi(\rho, z)$ of point charge is related to Poisson's equation as

$$\nabla_{\vec r}^2 \varphi(\vec r) = -\frac{4\pi e}{\varepsilon_S}\delta(\vec r - \vec r_0), \tag{1}$$

where $\delta(\vec r - \vec r_0)$ - is Dirac-delta function, $r = r(\rho, z)$ and $r_0 = r_0(0, z_0)$.

Here we are utilizing the cylindrical coordinate system *ρ, φ,* z. For that now are expressing the interaction potential in Fourier components $\varphi(k,z)$ with respect to the coordinate ρ as

$$\varphi(\vec r) = \varphi(\vec\rho, z) = \frac{1}{(2\pi)^2}\int_0^\infty e^{i\vec k\vec\rho}\varphi(k,z)\, d^2\vec k = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty J_0(k\rho)\,\varphi(k,z)\, kdk \ , \tag{2}$$

where $\vec k$ – is the electron 2D plane vector and J_0 – is the 0-th order Bessel function.

The Poisson's equation (1) with Exp. (2) for the discussed system then gets the form[5, 6]

$$\nabla_z^2\,\varphi(k,z,z_0)-k^2\,\varphi(k,z,z_0)=\begin{cases}-\dfrac{4\pi e}{\varepsilon_s}\delta(z-z_0) & z\ge 0\\ 0 & z<0\end{cases}. \tag{3}$$

The appropriate solution of the equation (3) possess inhomogeneous

$$\varphi^{in\hom}(k,z,z_0)=\frac{e^{-k|z-z_0|}}{k} \tag{4}$$

and homogeneous

$$\varphi^{\hom}(k,z,z_0)=\frac{2\pi e}{\varepsilon_S}\cdot\begin{cases}C_1e^{-kz} & z\ge 0\\ C_{2a}e^{-kz}+C_{2b}e^{kz} & 0\ge z>-L\\ C_{3a}e^{-kz}+C_{3b}e^{kz} & -L\ge z>-(L+D)\\ 0 & z\le-(L+D)\end{cases} \tag{5}$$

parts, comparatively, where $C_{3b}=C_{3a}e^{k(D+L)}\left(e^{k(2D+L)}-e^{-kL}\right)$.

Combining Exps. (4), (5) with Maxwell boundary conditions

$$\begin{cases}\varphi(k,z,z_0)\big|_{-(L+D)}=0\\ \begin{cases}\varphi(k,z,z_0)\big|_{z_i^-}=\varphi(k,z,z_0)\big|_{z_i^-}\\ \varepsilon_{i^+}\dfrac{\partial\varphi(k,z,z_0)}{\partial z}\bigg|_{z_i^+}=\varepsilon_{i^-}\dfrac{\partial\varphi(k,z,z_0)}{\partial z}\bigg|_{z_i^-}\\ z_i=-L;\ 0\end{cases}\end{cases}, \tag{6}$$

the general solution of Poisson's equation (3) is given by

$$\varphi(k,z,z_0)=\frac{2\pi e}{\varepsilon_S}\left\{e^{-k|z-z_0|}+e^{-k(z+z_0)}\cdot\right.$$
$$\left.\cdot\frac{\varepsilon_S-\varepsilon_D cth(kD)-\varepsilon_L th(kL)+\dfrac{\varepsilon_S\varepsilon_D}{\varepsilon_L}cth(kD)\,th(kL)}{\varepsilon_S+\varepsilon_D cth(kD)+\varepsilon_L th(kL)+\dfrac{\varepsilon_S\varepsilon_D}{\varepsilon_L}cth(kD)\,th(kL)}\right\}, \tag{7}$$

which is the comprehensive expression of the Coulomb interaction potential in inversion layer region for the discussed four-layer structure.

From Exp. (7) follows specific well known Coulomb potential particular expressions for the realistic heterogeneous structures such as:

1. In the absence of any dielectric layer, i.e. $D = L = 0$, the Exp. (7) reduces to the classic expression of the non conductor/ conductor junction case

$$\varphi(k,z,z_0) = \frac{2\pi e}{\varepsilon_S}\left\{e^{-k|z-z_0|} - e^{-k(z+z_0)}\right\}; \qquad (8)$$

2. In the absence of both metal and any one dielectric layer, i.e. L=0 with $D \to \infty$ (D=0 with $L \to \infty$), the interaction potential reduces to semiconductor/bulk dielectric junction corresponding expression* [5]

$$\varphi(k,z,z_0) = \frac{2\pi e}{\varepsilon_S}\left\{ e^{-k|z-z_0|} + e^{-k(z+z_0)} \cdot \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_{D(L)}}{\varepsilon_S + \varepsilon_{D(L)}}\right\}; \qquad (9)$$

3. In the presence of one dielectric layer, i.e. $L = 0$, the interaction potential goes to expression

$$\varphi(k,z,z_0) = \frac{2\pi e}{\varepsilon_S}\left\{ e^{-k|z-z_0|} + e^{-k(z+z_0)} \cdot \frac{\varepsilon_S - \varepsilon_D cth(kD)}{\varepsilon_S + \varepsilon_D cth(kD)}\right\} \qquad (10)$$

for the semiconductor/dielectric layer/metal junctions case [7].

3. Coulomb interaction potential in a three-layer MOSFET structure

Let now discuss Coulomb interaction potential properties after the Exp. (10) in a three-layer structure.

As well known, the effective thickness of the inversion layer in discussed structures is of the order of $d \sim (a_0 / n_S)^{1/3} << r_0$, where n_S is the surface density of the electrons in the layer, $r_0 = n_S^{1/3}$ – is the average

---

* *Obtained previously in [4], corresponding only to the case of very thin intermediate dielectric layer (kL<<1) in four-layer FET structure, Coulomb interaction potential expression goes into Eq. (9) barely under the condition L= 0.*

distance between electrons, and a_0 is the effective Bohr radius in a bulk semiconductor. Thus, an important role will be played subsequently by values of ρ that are large compared with d. For the latter there exists in the 2D wave vector interval k such that $k\,d \ll 1$. Therefore, Exp. (10) should be averaged under the conditions $k\,z \ll 1$ and $k\,z_0 \ll 1$, and as a result have [7]

$$\varphi(k) = \frac{4\pi\, e}{k} \frac{1}{\varepsilon_S + \varepsilon_D cth\,(kL)} . \tag{11}$$

In turn, for a thin enough dielectric layer with thickness $D \sim d$, which usually holds in real structures, for the aforementioned long wave related k vectors the additional condition $k\,D < 1$ can fulfilled as well. For that case Exp. (11) then can lead to the specific result in the form

$$\varphi(k) = \frac{2\pi\, e}{(\varepsilon_S / 2)} \frac{1}{k + \dfrac{\varepsilon_D}{\varepsilon_S D}} . \tag{12}$$

Here an expression of the three-layer FET structure Coulomb interaction potential Fourier-image is obtained, which with Eq. (2) will lead to the real–space potential final form such as

$$\varphi(\rho) = \frac{e}{\varepsilon_S / 2} \left\{ \frac{1}{\rho} - \frac{\pi}{2} \frac{\varepsilon_D}{\varepsilon_S D} \left[H_0\left(\frac{\varepsilon_D \rho}{\varepsilon_S D} \right) - N_0\left(\frac{\varepsilon_D \rho}{\varepsilon_S D} \right) \right] \right\} , \tag{13}$$

where $H(x)$ and $N(x)$ are Struve and Neumann functions.

4. Conclusions

1. Coulomb interaction potential in discussed case holds both the same k- and ρ- dependences as 2D screened counterparts in semiconductor/dielectric two- [5] and three- [6] layer dielectrically homogeneous systems. As follows, the metal gate here modifies the Coulomb interaction in the same manner such as the 2DEG by means of the statically screening effect in aforementioned systems.

2.The quantity, analogous to the screening parameter in noted homogeneous systems, here in Exp. (12) depends on both from the dielectric layer thickness and the neighboring media dielectric constants ratio (in 2DEG screened cases screening parameter is expressed by bulk sample Bohr radius only [5, 6]).

3. Since the interaction potential after Exp. (13) strongly depends on both dielectric layer thickness and dielectric constant value, by mutual manipulating of these quantities with ε_S we receive the access to discuss the coulomb characteristic phenomena specific to both low-k ($\varepsilon_D/\varepsilon_S < 1$) and high-k ($\varepsilon_D/\varepsilon_S > 1$) environment cases.

4.The interaction potential after Exp. (13) due to the factor $\varepsilon_S/2$ in the denominator is enhanced twice in relation to semiconductor/dielectric two- and three- layer dielectrically homogeneous system cases which is the characteristic property of discussed structure. In aforementioned cases the noted factor appears in the strong low-k environment case only [5, 6].

REFERENCES

1. *Trinh H.-D., et al.* Demonstrating 1 nm-oxide-equivalent-thickness HfO2/InSb structure with unpinning Fermi level and low gate leakage current density, Appl.Phys. Lett., 103, 142903-1-5 (2013).
2. *Robertsona J., Falabretti B.* Band offsets of high *K* gate oxides on III-V semiconductors , J. of Appl. Phys., 100, 014111-1-7 (2006).
3. *Orr J. M. S., et al.* Electronic transport in modulation-doped InSb quantum well heterostructures, Limit. Phys. Rev. B 77, 165334-1-7 (2008).
4. *Konar A., Bajaj M., Pandey R.K., Murali K.V.R.M.* Dielectric-environment mediated quantum screening of two-dimensional electron gas, J. of Appl. Phys., 114, 113707-1-6 (2013).

5. *Stern F., Howard W.E.* Properties of Semiconductor Surface Inversion Layers in the Electric Quantum Limit. Phys. Rev., 163, 816–835 (1967).
6. a) *Rytova N.S.* Coulomb interaction of electrons in thin films, Soviet Physics-Doklady, 10, 754–755 (1965).
b) *Rytova N.S.* The screened potential of the point charge in thin film. Vestnik Mosk. Univ. Fizika, Astronomia, 30, 30–37 (1967).
7. *Chaplik A.V.* Possible crystallization of charge carriers in low-density inversion layers, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 62, 746–753 (1972).

ELECTRONIC STATES IN CONICAL QUANTUM DOT IN THE PRESENCE OF ELECTRIC FIELD

D.B. Hayrapetyan

Russian-Armenian University, H. Emin 123, 0051, Yerevan, Armenia

ABSTRACT

In the framework of the adiabatic approximation, the energy states of electron are investigated in conical quantum dot in the presence of electric field. Analytical expressions for particle energy spectrum and wave function are obtained. The dependences of the energy on the conical high and radius of the base of cone are obtained. The behaviour of the energy levels depending on the external field magnitude is revealed. The electron localization probability density are plotted

Keywords: Conical quantum dot, electric field, adiabatic approximation

1. Introduction

The conical quantum dots (CQD) are zero-dimensional quantum nanostructure with nontrivial geometry. Analytic description of electronic states in CQDs is difficult problem [1-5]. From the other side, an availability of many geometrical parameters characterizing the CQD allows to realize flexible manipulation of the energy levels of the charge carriers in these systems. The radius of the base, the height (or, equivalently, the cone angle) are from above mentioned geometric parameters of CQD.

It is clear, that changing geometrical parameters of CQD we can manipulate the energy levels of the electrons in these systems which lead to the change of the intraband and interband quantum transitions behavior.

Theoretical study of physical processes in the CQD was held in [5–7]. It should be noted, that for the theoretical description the form of confining potential of observed nanostructure has fundamental importance. In such systems, an important role may play, in particular, a mechanical stress effects. This question has been studied in [8, 9].

In addition to the manipulation of energy levels with geometrical parameters, the external electric and magnetic fields causing quantization are alternative tools of control. The strong external fields, at certain values of their intensities, may have the same, or even stronger size quantization effect on the energy spectrum than the QDs shape variation. Note, that the electric field affects the electron motion only in axial direction.

In this paper the energy states of electron in CQD are investigated in the presence of electric filed within the framework of adiabatic approximation.

2. Theory

Let us to consider an impenetrable conical QD with H height, R radius of the base of cone and θ angle of the top of cone. Note that we consider the case of small angles of the top of cone $\theta \ll 1$, which means that $R \ll H$ and hence $tg\theta = R/H \ll 1$. Such a case is possible when, during the experiment, conical quantum dots were grown with high height [1-3]. Condition $\theta \ll 1$ gives us opportunity to apply geometrical adiabatic approximation for solving the problem. The potential energy of electron in such structure has the following form:

$$U_{conf}\left(\rho,\varphi,z\right)=\begin{cases}0, \ particle\in\Delta,\\ \infty, \ particle\notin\Delta.\end{cases} \quad (1)$$

As it follows from the geometrical form of CQD that the electron motion along the radial direction occurs more rapidly than along the z-direction. This allows one to use the adiabatic approximation. The frequency of the radial “motion” is much greater than the frequency

characterizing the "motion" along the axis of the cone. Consequently, the Hamiltonian of the system can be represented as a sum of the Hamiltonians for the "fast" ($\hat{H}_f$) and "slow" ($\hat{H}_s$) subsystems:

$$\hat{H}(\rho,\varphi,z)=\hat{H}_f(\rho,\varphi;z)+\hat{H}_s(\rho,\varphi,z), \tag{2}$$

where

$$\begin{aligned}\hat{H}_f(\rho,\varphi;z)&=-\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\left(\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)+\frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right)+U_{conf}(\rho,\varphi,z),\\ \hat{H}_s(z)&=-\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}-eFz.\end{aligned} \tag{3}$$

where m_e^* – effective mass of charge carrier, F is electric field magnitude. Axial variable z in $\hat{H}_f(\rho,\varphi;z)$ plays the role of a constant parameter. According to geometrical adiabatic approximation, the wave function of the system is represented as following:

$$\Psi(\rho,\varphi,\mathrm{z})=Ce^{im\varphi}f(\rho;z)\chi(z). \tag{4}$$

After solving the Schrödinger equation for the "fast" subsystem for the energy and wave function we get

$$f(\rho;z)=\frac{J_m\left(\lambda_{n_\rho+1,|m|}(\rho/R)/(1-z/H)\right)}{\sqrt{\pi}(1-z/H)RJ_{|m|+1}\left(\lambda_{n_\rho+1,|m|}\right)},\quad E_{n_\rho,|m|}(z)=\frac{\lambda^2_{n_\rho+1,|m|}}{(1-z/H)^2R^2}. \tag{5}$$

where $\lambda_{n_\rho,|m|}$ are zeros of the Bessel functions of the first kind $\left(n_\rho=0,1,2,...\right)$ [10]. For the lower levels of the spectrum the particle is mainly localized in the region $|z|\ll H$. Based on this we expand $E^{rad}_{n_\rho,|m|}(z)$ into a series:

$$E^{rad}_{n_\rho,|m|}(z)=E^{(0)}_{rad}\left(1-\frac{z}{H}\right)^{-2}\approx E^{(0)}_{rad}\left(1+2\frac{z}{H}\right), \tag{6}$$

where $E_{rad}^{(0)} = \frac{\hbar^2 \lambda_{n_\rho,|m|}^2}{2m_e^* R^2}$. The relation (6) represents an effective potential which is incorporated in Schrödinger equation of the "slow" subsystem

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e^*}\frac{\partial^2}{\partial z^2}\chi(z) + E_{rad}^{(0)}\left(1 + 2\frac{z}{H}\right)\chi(z) - eFz\chi(z) = E\chi(z). \qquad (7)$$

Finally, for the axial wave function and total energy of the system we can write:

$$\chi(z) = \left(f^{-1/3} Ai'(\alpha_{n+1})^2\right)^{-1/2} Ai\left(f^{1/3} z + \alpha_{n+1}\right),$$

$$E = E_{rad} + E_{ax} = \frac{\hbar^2 \lambda_{n_\rho,|m|}^2}{2m_e^* R^2} - \frac{\hbar^2}{2m_e^*}\left(\frac{2\lambda_{n_\rho+1,|m|}^2}{HR^2} - \gamma F\right)^{2/3} \alpha_{n+1}. \qquad (8)$$

where $\{\alpha_{n+1}\}$, $(n = 0,1,2,...)$ are zeros of the Airy function of the first kind ($\alpha_1 \approx -2.338$, $\alpha_2 \approx -4.087$ etc.) [10].

3. Result and Discussion

Let's proceed to the discussion of the results. Note that the numerical calculations are made for the conical QD from GaAs with the following parameters: $m_e^* = 0.067 m_e$, $\kappa = 13.18$, $E_R = 5.275$ me V, $a_B = 104$ Å. Fig. 1 shows the dependence of the energy levels of the charge carrier from the base radius of CQD for the fixed value of the CQD's height.

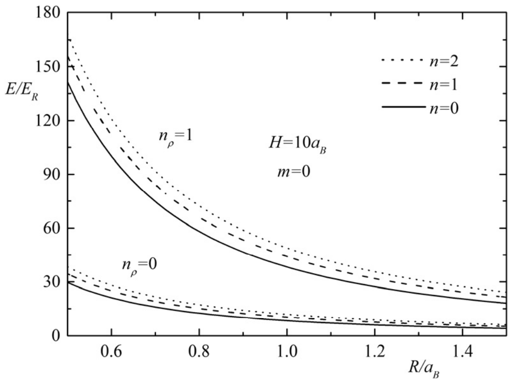


Fig. 1. The dependence of the energy levels of the electron from the base radius of CQD for the fixed value of the height

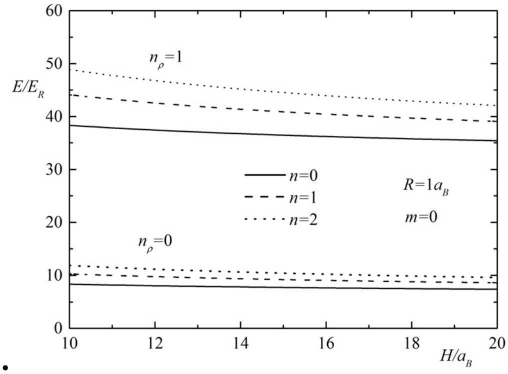


Fig. 2. The dependence of the energy levels of the electron from the height of CQD for the fixed value of the base radius.

Note that each level of the "fast" subsystem has a family of "slow" subsystem levels positioned thereupon. One can see from Fig. 1 with increasing base radius energy of the particle reduces, since the contribution to the energy of the size quantization decreases. The difference between the energy levels of the same energy level's family is increased with increase in the axial quantum number. For example: $\Delta E_{10} = 1.12 E_R$, when $R = 1.5 a_B$, $H = 10 a_B$ $\left(n_\rho = 0,\ m = 0\right)$ and $\Delta E_{10} = 3.4 E_R$, when $R = 1.5 a_B$, $H = 10 a_B$ $\left(n_\rho = 1,\ m = 0\right)$. Note that the transition frequency between this energy levels are $\Delta\Omega_{10}\left(n_\rho = 0, m = 0\right) = 1.43 \cdot 10^{12} c^{-1}$ and $\Delta\Omega_{10}\left(n_\rho = 1, m = 0\right) = 4.3 \cdot 10^{12} c^{-1}$, which falls into the IR part of spectrum. Fig. 2 shows the dependence of the energy levels of the electron from the height of CQD for the fixed value of the CQD's base radius. The dependence of the energy levels on the height of CQD has the same behaviour to the dependence of radius: with the increase of the height energy levels are reduced.

Note that the total energy of the system is more "sensitive" to changes of the R parameter, which is a consequence of the higher contribution of size quantization into the electron energy in radial direction. The same increase in the difference between the energy levels of the same energy level's family is occurs for this dependence.

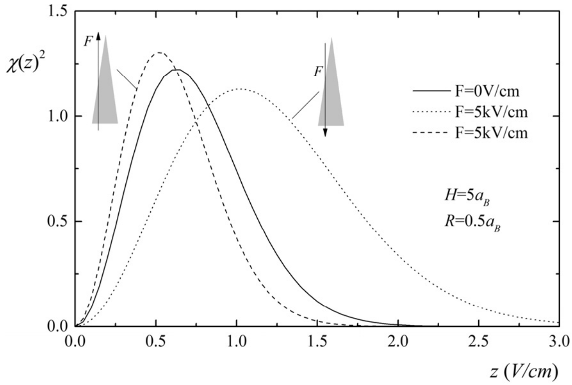


Fig. 3. The dependence of the electron probability density on the magnitude of the electric field.

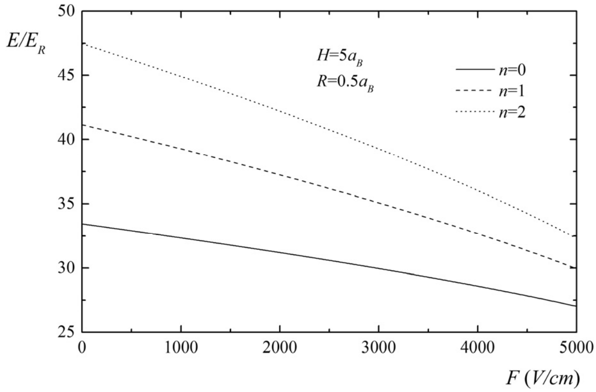


Fig. 4. The dependence of the electron energy on the magnitude of the electric field.

Fig. 3 shows the dependence of the electron probability density on the magnitude of electric field, for the different directions of the field. As we can see from the figure, the applied electric field lead to the change of the localization area of the electron. Wherein, the electron shifts to the CQD base when the field is directed to the top of the cone. The change in the direction of the field leads to the opposite effect. Finally, Fig. 4 shows the dependence of the electron energy on the electric field magnitude, when the field directed to the top of CQD. As we can see, with the increase of the field value the electron energy decreases.

4. Conclusion

Summarizing, the electronic states and optical properties of CQD are studied. The dependence of energy levels on the geometrical parameters of CQD and external electric field magnitude are obtained analytically with the help of adiabatic approximation. Each level of the "fast" subsystem has a family of "slow" subsystem levels positioned thereupon. The applied field lead to the change of the electron localization area and the decrease of the electron energy.

REFERENCES

1. *Huh J.H., et al.* Fabrication of metal embedded nano-cones for single quantum dot emission, Japanese Journal of Applied Physics, 50 (6S) 06GG02, 2011.
2. *Lenz A., et al.* Reversed truncated cone composition distribution of In0. 8Ga0. 2As quantum dots overgrown by an In0. 1Ga0. 9As layer in a GaAs matrix, Applied Physics Letters, 81(27) 5150–5152, 2002.
3. *Khordad R., Bahramiyan H.* Optical properties of a GaAs cone-like quantum dot: Second and third-harmonic generation, Optics and Spectroscopy, 117(3) 447–452, 2014.
4. *Kazaryan E.M., Petrosyan L.S., Shahnazaryan V.A., Sarkisyan H.A.* Quasi-conical quantum dot: electron states and quantum transitions, Communications in Theoretical Physics, 63 (2). PP. 255–260, 2015.
5. *Lozovskiy V., Pyatnytsya V.* The Analytical Study of Electronic and Optical Properties of Pyramid-Like and Cone-Like Quantum Dots, J. Comput. Theor. Nanosci., 8, 1–9, 2011.
6. *Hayrapetyan D.B., Kazaryan E.M., Sarksiyan H.A.* Magneto-absorption in conical quantum dot ensemble: Possible applications for QD LED, Optics Communications, 371, 138–143, 2016.

7. *Hayrapetyan D.B., Chalyan A.V., Kazaryan E.M., Sarkisyan H.A.* Direct Interband, Light Absorption in Conical Quantum Dot, Journal of Nanomaterials, vol. 2015, Article ID 915742, 6 p., 2015.
8. *Yu-Min L., Zhong-Yuan Y., Xiao-Min R.* The influences of thickness of spacing layer and the elastic anisotropy on the strain fields and band edges of InAs/GaAs conical shaped quantum dots, Chinese Physics B, 18 (1) 16–22, 2009.
9. *Cheche T.O., Chang Y.C.* Analytical approach for strain and piezoelectric potential in conical self-assembled quantum dots, Journ. of Appl. Phys., 104(8) 083524, 2008.
10. *Abramowitz M., Stegun I.* In Handbook of mathematical functions, Applied Mathematics Series, 1966.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Редактор *– М.Э. Авакян*
Корректоры *– Э.А. Рухкян, М.Р. Тадевосян*
Комьютерная верстка *– А.Г. Антонян*

Адрес Редакции научных изданий
Российско-Армянского
университета:

0051, г. Ереван, ул. Овсепа Эмина, 123
тел./факс: (+374 10) 27-70-52 (внутр. 42-02)
e-mail: redaction.rau@gmail.ru

Заказ № 14
Подписано к печати 22.06.2017г.
Формат 70х100 $1/_{16}$. Бумага офсетная № 1.
Объем 7.75 усл. п.л. Тираж 100 экз.